منشورات جامعة حلب
كلية العلوم

ميكانيك الكم

"I"

الدكتور
قيصر فيازمينسكي

لطلاب السنة الثالثة

قسم الفيزياء

مديرية الكتب والمطبوعات الجامعية

١٤٠٣هـ - ١٩٨٣م

$\cos(-n\pi)$

$= \cos n\pi$ odd

$= \sin(-n\pi)$

$= \sin n\pi$

ميكانيك الكم

منشورات جامعة حلب
كلية العلوم

ميكانيك الكم

"I"

الدكتور
قيصر فيازمينسكي

مديرية الكتب والمطبوعات الجامعية
١٩٨٢ - ١٩٨٣

لطلاب السنة الثالثة في الفيزياء
١٤٠٢ - ١٤٠٣

عيسى ابو يوسف الدويشي

الاهداء

الى من لولا صبرها وتضحيتها مااستطعت انجاز هذا العمل ...

الى زوجتي ميّ .... أهدى هذا الكتاب .....

*
* *
*

متاح للتحميل ضمن مجموعة كبيرة من المطبوعات من صفحة
مكتبتي الخاصة
على موقع ارشيف الانترنت
الرابط
https://archive.org/details/@hassan_ibrahem

مقدمة

ان د ور ميكانيك الكم كأساس لحقول الفيزياء الحد يثة كافة امر مسلم به . وبالحقيقة فلقد تطورت جميع حقول الفيزياء الحد يثة بعد ارساء النظرية الكوانتية خلال الاعوام 1925 - 28 . لقد جاءت النظرية الكوانتية ثمرة لجهود متضافرة قام بها اعلام في الفيزياء من امثال بورن وهيزنبرغ وشرود نجر ود يراك وباولي ، ولا ننسى طبعا د ور بلانك واينشتين وبور في ابراز النظرية الى حيّز الوجود .

اذا انتقلنا الا ن الى ميدا ن تَعَلم ميكانيك الكم ، فانا نجابه منذ اللحظة الاولى انحرافا جليا عن مفاهيم الفيزياء الكلاسيكية واساليبها ، ويشعر الدارس بافتقاد اولي الى الحس الفيزيائي . وبالفعل ، وخلال سنوات دراسته الطويلة ينشأ لدى الطالب احساس فيزيائي معين تدعمه خبرة الحياة اليومية بالحواد ث الفيزيائية وتقويه ، ولكن عند ما ينتقل الدارس الى ميدا ن الكم يشعر ان ميكانيك الكم يتعارض جذ ريا مع هذه الخبرات المكتسبة ومع الحس الفيزيائي المألوف . وهذا الشعور محق ، فميكانيك الكم ان شئت القول ، لا يتفق والحس البد يهي الذى اكتسبناه من خبرتنا الد رسية السابقة . وريثما يتولد حس جد يد بالمسائل الفيزيائية وينمو لا بد من معاينة العد يد من مشاكل ميكانيك الكم وحلولها من جهة ، ومن التعرف على اسس ميكانيك الكم بشكلها الواسع من جهة اخرى . وبالحقيقة، فان الكثير من الكتب الد رسية في ميكانيك الكم توجز اسسه النظرية وتنتقل بسرعة الى تطبيقاته ، وقد يكون منهجها هذا مبررا بالغرض الذى تنشده . ولكن هذا المنهج لا يعلّم الطالب ميكانيك الكم مطلقا ، بل يبقيه في حيز التطبيقات البسيطة ويعرضه الى الحيرة والضياع عند أية مشكلة تتطلب منه زمام المبادرة .

لقد حاولت في كتابي أن أؤدي ثلاثة اهداف رئيسية وهي : بناء الحس الفيزيائي

بالميكانيك الجديد ،ثم صياغة ميكانيك الكم صياغة عامة وادخال الأداة الرياضية اللازمة ،وأخيرا تطبيق ميكانيك الكم لحل مشاكل متعددة في حقول فيزيائية شتى وبالرغم من ان فصولا عديدة تخدم الاهداف الثلاثة معا ، الا أنه يمكن تقسيم فصول الكتاب من حيث المضمون الى ثلاثة اقسام :

- قسم الاداة الرياضية اللازمة لبناء النظرية ، ويعالجه الفصلان II و III اللذان يدرسان فراغ هلبرت والمؤثرات فيه .

- قسم اسس ميكانيك الكم ومفاهيمه وتعالجه الفصول IV و VII و IX ،اذ يَبني الفصل الرابع ميكانيك الكم بشكل تسليمي ويوضح الاسس الفيزيائية التي تقوم عليها هذه المسلمات ، ويقوم الفصل السابع بتتميم الفصل الرابع وذلك بشرح معادلات الحركة ،كما يقويه ايضا بادخال التقريب الكلاسيكي والاعتبارات التناظرية للفراغ . وفي الفصل التاسع يكتمل بناء النظرية الكوانتية بادخال السبين .

- قسم التطبيقات وتعالجه الفصول V و VI و VIII و IX و X و XI و XII . وتقوم هذه الفصول في الوقت نفسه بتمتين مفاهيم ميكانيك الكم واسسه ،كما تعالج مسائل ذات تطبيقات في الجسم الصلب والبلورات ونظرية العصابات والالكترون الحر والفيزياء النووية والكيمياء البنيوية .

يلاحظ القارئ في معظم فصول الكتاب المتعلقة بالتطبيقات وجود سويتين تعالج اولاهما الخطوط العريضة للمسألة بسهولة ويسر وهي سهلة الفهم على الطالب، وتقوم السوية الثانية بتعميم هذه النتائج والمضي بالحسابات الى ابعد مداها . ان وجود هاتين السويتين ميزة ايجابية فهي تصل بالطالب المتوسط المستوى الى النقطة المنشودة تقريبا ، ودون أن يتعرض الى خسارة استيعاب كبيرة من جراء عدم تمكنه من ملاحقة الشكل المعمم للحسابات والنتائج . وبسبب هذا البنيان المزدوج المستوى ، يمكن ان يعدّ المؤلّف كتابا تدريسيا ومرجعا للبحث في الوقت نفسه .

يظهر في الكتاب ابحاث أُشّر اليها بحروف لاتينية ، وهي ذات صفة مكملة للابحاث السابقة او ذات صفة حسابية صرف ، وباستطاعة القارئ تجاوز هذه الابحاث

في القراءة الاولى دون ان يختل السياق العام . وبمقدوره متى احتاج الامر العودة الى هذه البحوث لالتقاط النتيجة اللازمة لسير العمل دون الخوض في البراهين والمحاكمات المؤدية الى تلك النتيجة . كما تظهر في الكتاب ايضا فقرات أشرّ اليها بالرمز * وهي غالبا ذات صفة توضيحية او مكمّلة ويمكن القارئ تجاوزها ايضا في القراءة الاولى .

لقد أُعِدّ هذا الكتاب لطلاب السنة الثالثة في الفيزياء بما يتفق والخطة الدرسية الموضوعة من قبل وزارة التعليم العالي . ولقد جاءت طريقة عرضه ومواضيعه لتؤهب طلاب السنة الثالثة للانتقال الى مقرر ميكانيك الكم II في السنة الرابعة مستندين الى قاعدة صلبة في ميكانيك الكم .

آمل ختاما ان اكون قد وُفّقت في بلوغ الاهداف التي نشرتها في كتابي .

حلب في ١/١٢/١٩٨٢

- المؤلف -

قيصر فيازمينسكي

عيسى يوسف الكويتي

* * *

حسن يوسف الكويتي

المحتويات

	الصفحة
§0. مصطلحات ورموز رياضية	١٥
I. الفصل الاول : موجز في الميكانيك الكلاسيكي	١٧
§1 صياغة نيوتن	١٧
§2 الاحداثيات المعممة ومعادلات لاغرانج	١٨
§(2.1) طريقة التغيير	١٩
§(2.2) معادلات لاغرانج في الحركة	٢١
§3 صياغة هاميلتون	٢٣
§4 معترضات بواصون وثوابت الحركة	٢٧
§5 الملحوظات الفيزيائية	٢٨
§6 معادلة جاكوبي	٢٩
§7. التحويلات القانونية	٣٠
II الفصل الثاني : فراغ التوابع الموجية	٣٥
§1 الفراغ الشعاعي (تعريف ـ حقائق ـ تعاريف ونظريات)	٣٥
§2 فراغ الجداء الداخلي (تعريف ـ حقائق ـ امثلة ـ فراغ التوابع الموجية، ماذا نقصد به) .	٣٩
§3 الاستعماد والاستنظام (الاستنماد) (تعاريف ـ حقائق ـ نظرية غرام شميدت في الاستنماد ـ متراجحة شوارتز ـ تمارين) .	٤٥
§A الفراغات المنظمة ـ النظيم (تعريف ـ امثلة عن الفراغات المنظمة ـ الفراغ المنظم كفراغ مترى)	٥٤
§B بعض الخواص المترية في فراغات الجداء الداخلي المنظمة (تعاريف ـ حقائق ـ الفراغات المترية القابلة للفصل)	٥٧

§ C. فراغات هلبـرت ٥٩
§ D. فراغ التوابع التربيعية المكاملة (فراغ هلبرت $\mathcal{L}^2(D)$) ٦٠
§ E. تمثيل فراغات هلبرت القابلة للفصل ٦٣

III الفصل الثالث : الموءثرات في فراغ التوابع الموجية ٦٧

§1. الموءثرات الخطية (مفهوم موءثر ـ تعريف الموءثرات الخطية) ٦٧
§2. جبر الموءثرات (العمليات في الموءثرات ـ امثلة وتمارين) ٦٨
§3 المبادل (تعريف ـ خواص عملية المبادل ـ امثلة وتوضيحات) ٧٢
§4 تمثيل الموءثرات الخطية بمصفوفات (الطريقة ـ حالة خاصة : فراغ الجداء الداخلي ـ حالة الفراغ اللامنتهي البعد ـ العمليات في الموءثرات والتمثيل) . ٧٦
§5 الموءثرات الهرميتية (تعريف ـ حقائق ـ تمارين) ٨٠
§6. مرافق موءثر (تعريف ـ حقائق ـ تمارين) ٨٤
§7. المعادلة الخاصة (تعاريف ـ نظريات ـ المعادلة المميزة ـ تمثيل موءثر بدلالة اشعته الخاصة ـ تمارين) . ٨٨

IV الفصل الرابع : اسس ميكانيك الكم ١٠١

§1. المبادىء العامة لميكانيك الكم ١٠١
§2 مسلمات ميكانيك الكم ١٠٧
المسلمة الاولى : حالة الجملة والتابع الموجي ١٠٧
المسلمة الثانية : I طيف الملحوظات الفيزيائية . ١٠٩
II تراكب الحالات
المسلمة الثالثة . تمثيل الملحوظات الفيزيائية ١١٠
المسلمة الرابعة : القياس الاعظمي ـ تحضير جملة في حالة معلومة ١١٤
المسلمة الخامسة : صف القياسات المحتّمة النتائج ، الحالات المستقرة ١٢٠
المسلمة السادسة : القيمة المتوقعة لملحوظ فيزيائي ١٢١
المسلمة السابعة : معادلات الحركة ١٢٤

§3 جملة عدة جسيمات ١٢٧

§٤ مبدأ هايزنبرغ في الارتياب ١٣٤

V الفصل الخامس : تطبيقات على معادلة شرودنجر ١٣٧

§1 مؤثر هاميلتون ومعادلة شرودنجر ١٣٧

§2 الحالات المستقرة ١٣٨

§3 بعض خواص حلول معادلة شرودنجر ١٤١

§٤ الحل العام لمعادلة شرودنجر ١٤٤

§5 تطبيق حركة جسيم حر ١٤٦

§6 انحفاظ الاحتمال وتدفق الجسيمات ١٤٨

§7 جسيم في بئر كموني ١٥١

§8 العتبة الكمونية ١٥٦

§9 ظاهرة النفق ١٦١

§10 نموذج الالكترون الحر ١٦٣

§11 الشروط الدورية على التابع الموجي في بلورة غير منتهية ـ نظرية بلوخ ١٦٦

§12 نموذج كرونيغ وبني لبلورة غير منتهية ذات بعد واحد ـ عصابات الطاقة ١٧٢

VI الفصل السادس : الهزاز البسيط التوافقي ١٨١

§1 دراسة كلاسيكية موجزة ١٨١

§2 تكميم الهزاز التوافقي ١٨٣

§3 التوابع الخاصة لطاقة الهزاز ١٨٦

§٤ تماثل حالات الهزاز التوافقي ١٨٨

§5 تمارين ١٨٩

§ A. حول كثيرات حدود هرميت ١٩٢

§ 6. حساب قيم الطاقة للهزاز وتوابعة الخاصة بطرق جبرية ١٩٧

§ 7. الطرائق الجبرية والقيم المتوقعة ٢٠١

§ 8. التمثيل المصفوفي ـ $\hat{H}$ للهزاز التوافقي ٢٠٤

VII الفصل السابع : معادلات الحركة وقوانين الانحفاظ ٢١١

§1. التابع الموجي شبه الكلاسيكي ٢١١

§2. النهاية الحدية لموئثر هاميلتون ٢١٣

§3. المشتق الزمني لملحوظ فيزيائي ٢١٤

§4. التحويلات الواحدية ٢١٦

§(4.1) الموئثرات الواحدية ٢١٦

§(4.2) التحويلات الواحدية ٢١٦

§(4.3) التحويلات اللامتناهية في الصغر ٢١٧

§(4.4) تمارين على التحويلات الواحدية ٢١٨

§5. صورتا شرودنجر وهايزنبرغ ٢١٩

§6. نظرية ايرنفست ٢٢٣

§7. التناظر وقوانين الانحفاظ ٢٢٤

§8. التناظر والدفع والعزم الحركي ٢٢٦

§9. التناظر وموئثر هاميلتون ٢٢٩

§10. موئثر القلب والتماثل ٢٣٢

VIII. الفصل الثامن : العزم الحركي (الزاوى) ٢٣٧

§1. موئثرات العزم الحركي ٢٣٧

§2. قيم $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ الخاصة ٢٣٩

§3. موئثرات العزم الحركي في الاحداثيات القطبية ٢٤٧

§4. التوابع الخاصة للعزم الحركي ٢٤٨

§A. ماذا عن توابع ليجندر ٢٥٤

§(A.1) كثيرات حدود ليجندر ٢٥٤

§(A.2) توابع ليجندر المرفقة ٢٥٧

§(A.3) حل المعادلة الخاصة $\hat{L}^2 Y_{\ell m} = L^2 Y_{\ell m}$ ٢٦٢

§5 التمثيل المصفوفي ٢٦٣

§ 7. جمع العزوم الحركية ٢٦٨

IX الفصل التاسع : الحركة في حقل مركزي ٢٧٣

§ 1. معادلة شرود نجر في الاحداثيات القطبية ٢٧٣

§ 2. الذرات شبه الهيدروجينية ٢٧٥

§ (2.1) سويات الطاقة وتوابع حالاتها الخاصة ٢٧٥

§ (2.2) الأعداد الكوانتية ٢٨٠

§ (2.3) مفعول زيمن ٢٨٢

§ 3. مسألة القوة المركزية بين جسيمين ٢٨٤

§ 4. الهزاز التوافقي الثلاثي البعد ٢٨٨

§ 5. اشعاع ذرة الهيدروجين ٢٨٩

§ 6. الانتقالات المحظورة وقواعد الاصطفاء ٢٩١

§ 7. قواعد الاصطفاء للهزاز التوافقي ٢٩٤

§ A. كثيرات حدود لاغيور ٢٩٥

§ B. اللابلاسيان في الاحداثيات المعممة . ٣٠٠

§ C. نظرية حول مقارنة السلاسل . ٣٠٢

X الفصل العاشر : نظرية الاضطراب ٣٠٣

§ 1. مقدمة ٣٠٣

§ 2. ذرة الهيليوم ٣٠٤

§ 3. تعريف الاضطراب ٣٠٧

§ 4. نظرية الاضطراب للحالات غير المتحللة ٣٠٨

– التقريب من المرتبة الاولى ٣١١

– التقريب من المرتبة الثانية ٣١٣

§ 5. الهزاز البسيط اللاتوافقي ٣١٥

§ 6. نظرية الاضطراب في الحالة المتحللة ٣٢٠

§ 7. مفعول ستارك ٣٢٢

§ 8. طريقة التغيير ٣٢٧
§ 9. طرق التقريب مطبقة على ذرة الهيليوم ٣٣٠
§ A. حول توابع أولر ٣٣٣
§ B. حساب القيمة المتوقعة للحد المضطرب في ذرة الهيليوم ٣٣٥

XI الفصل الحادي عشر : نظرية سبين الالكترون ومبدأ الاستبعاد ٣٣٧

§ 1. النظرية التقليدية لم تكتمل بعد ٣٣٧
§ 2. محاولة ترميم النظرية ٣٤٠
§ 3. الجمل ذات السبين 1/2 ٣٤١
§ (3.1) فراغ الحالات السبينية ـ السبينورات ٣٤٢
§ (3.2) مصفوفات باولي ٣٤٥
§ (3.3) خواص مصفوفات باولي ٣٤٧
§ (3.4) مؤثرات السبين ٣٤٩
§ (3.5) تمارين محلولة ٣٤٩
§ 4. جملة افتراضية من جسيمين متمايزين ٣٥٤
§ 5. ترنح سبين الالكترون ٣٥٨
§ 6. استيعاب السبين في النظرية الكوانتية ٣٦١
§ 7. تطبيق : اثر الحقل المغناطيسي في سويات الطاقة ٣٦٤
§ 8. العزم الحركي الكلي ٣٦٧
§ 9. مبدأ باولي التجريبي ٣٦٩
§ 10. مبدأ لا تمايز الجسيمات المتطابقة ٣٧٠
§ 11. الاحصاء ومبدأ الاستبعاد ٣٧٢
§ 12. الاشكال الالكترونية وقواعد هاند ٣٧٧
§ 13. الجدول الدوري ٣٨٢

XII . الفصل الثاني عشر : تفاعل جسيم مشحون وحقل كهرطيسي ٣٨٧

§ 1. حركة جسيم دون سبين في حقل كهرطيسي . ٣٨٧

§2. معادلة باولي ـ شرود نجر ٣٨٩
§3. حركة الكترون في حقل كهرطيسي ٣٩١

§٩. التفاعل السبيني ـ المداري ٣٩٨
§(9.1) طاقة التفاعل السبيني ـ المداري ٣٩٨
§(9.2) نشوء الثنائيات ٤٠٠
§(9.3) الثنائيات في الذرات شبه الهيدروجينية ٤٠٣
§(9.4) الهاميلتوني النسبي ٤٠٥

المصطلحات الاجنبيــــة ٤٠٩
المراجـــــع ٤٢٣

مصطلحات ورموز رياضية

$\mathbb{R}$ و $\mathbb{N}$ و $\mathbb{Z}$ و $\mathbb{Q}$ مجموعات الاعداد الحقيقية والطبيعية والصحيحة والعادية على الترتيب .

$\mathbb{C}$ مجموعة الاعداد المركبة .

$\mathbb{R}_+$ مجموعة الاعداد الحقيقية الموجبة .

$\{\ldots\}$ رمز لمجموعة ، $\{\cdot,\cdot\}$ معترضة بواصون ، $[\cdot,\cdot]$ المبادل او معترضة لي .

V فراغ شعاعي وقد ترمز الى الطاقة الكامنة .

$\langle\cdot|\cdot\rangle$ جداء داخلي لشعاعين ، $V, \langle\cdot|\cdot\rangle$ فراغ جداء داخلي .

Ψ عادة للتابع الموجي . Ψ^* المرافق العقدي ل Ψ .

$|\Psi|^2=\Psi^*\Psi$ مربع القيمة المطلقة لقيمة Ψ عند نقطة .

$\|\Psi\|$ نظيم او طويلة التابع Ψ .

$\mathcal{L}^2(D)$ فراغ التوابع التربيعية المكاملة على المنطقة D (فراغ التوابع الموجية) .

$\hat{A}$ المؤثر الممثل للملحوظ الفيزيائي A (او الملحوظ الفيزيائي نفسه) .

$\hat{H}$ و $\hat{\underline{P}}$ مؤثر هاميلتون ومؤثر الدفع على الترتيب .

H و P الهاميلتوني والدفع الكلاسيكيان .

E الطاقة (القيمة الخاصة ل $\hat{H}$) ، $\underline{P}$ القيمة الخاصة ل $\hat{\underline{P}}$.

$\hat{V}_m$ الطاقة المغناطيسية الكامنة .

$\hat{V}_s$ الطاقة المغناطيسية السبينية الكامنة .

$\hat{V}_{SL}$ طاقة التفاعل السبيني المداري .

$\hat{\underline{L}}$ شعاع العزم الحركي ، $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ التوابع الخاصة ل $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$

.... التوابع الخاصة المتعلقة بذرة الهيدروجين $\Psi_{n\ell m_\ell m_s}=R_{n\ell}(r)\,Y_{\ell m}(\phi,\theta)\,\xi_{m_s}$

$R_{n\ell}(r)$ كثيرات حدود لاغيور ، ξ_{m_s} شعاع خاص ل S_z .

n و ℓ و m_ℓ و m_s الأعداد الكوانتية : الرئيسي والمداري والمغناطيسي والسبيني على الترتيب.

$[A_{ij}]$ أو $[\hat{A}]$ المصفوفة الممثلة للمؤثر A .

$|A_{ij}|$ أو $det[A_{ij}]$ معين المصفوفة $[\hat{A}]$.

$\hat{A}^{+}$ المرافق الهرميتي لمؤثـر $\hat{A}$.

$[\tilde{A}]$ منقول المصفوفة $[A]$ و $[A]^{*}$ مرافقها العقدى .

$Trace[A]$ أثر أو ذيل المصفوفة $[A]$.

$Sp\,\hat{A}$ طيف الملحوظ $\hat{A}$ او مجموعة قيمة الخاصة .

$\langle A\rangle_{\psi}$ القيمة المتوقعة للملحوظ $\hat{A}$ في الحالة ψ .

$(\Delta A)^{2} = Var\,\hat{A}$ التشتت او الانحراف التربيعي .

$\Delta\hat{A}$ الشك او الارتياب او الانحراف في قيمة $\hat{A}$.

... مستنمدة او متنامدة = مستعمدة مستنظمة = متعامدة منظمة .

I_n موئثر او مصفوفة الواحدة في فراغ بعده n .

Inv موئثر التماثل .

ω النبض أو التواتر الزاوى ، ν التواتر .

$\omega_{nm} = E_n - E_m / \hbar$

$\underline{\mu}$ شعاع العزم المغناطيسي .

$\underline{M}$ شعاع العزم المغناطيسي السبيني .

* * *

الفصل الأول

موجز في الميكانيك الكلاسيكي

برغم أن ميكانيك الكم يختلف جذريا عن الميكانيك الكلاسيكي في الصورة التي يعرضها للعالم الفيزيائي وفي الطريقة التي تصاغ بها مفاهيمه وقوانينه ، الا ان نجاح النظرية الكلاسيكية في تفسير ظواهر متعددة للعالم الماكروسكوبي واتساع مجالات تطبيق هذه النظرية تقترح بأن ميكانيك الكم يرتبط بشكل ما بالميكانيك الكلاسيكي . بالحقيقة لقد تطورت النظرية الكوانتية صياغةً باتباع مُشابهة قريبة الصلة ، ان لم تكن موازية للصياغة الكلاسيكية ، وعلى الأخص صياغة هاميلتون للميكانيك الكلاسيكي . وسوف يتضح هذا التوازي بين الصياغتين في الفصول القادمة. من اجل هذا السبب سوف نوجز هنا اساليب الصياغة المختلفة للميكانيك الكلاسيكي . نفترض في القارىء الالمام بالمادة التي يغمرها هذا الفصل ، واذا لم يكن الأمر هكذا ، فاننا ننصح القارىء بالعودة الى بعض المراجع في الميكانيك الكلاسيكي حيث تعالج مادة هذا الفصل بتفصيل اكبر (16) .

1§ – صياغة نيوتن :

تعتبر المادة في الفيزياء الكلاسيكية مجموعة نقاط مادية تتحرك تحت تأثير قوى متبادلة ، وتخضع المادة في حركتها لقوانين نيوتن الثلاثة (قانون العطالة – وقانون القوة – وقانون تكافوء الفعل ورد الفعل) . يعّد قانون نيوتن الثاني :

$$\underline{F} = m \; d^2\underline{r}/dt^2 \qquad (1.1)$$

حيث ان m كتلة النقطة المادية و $\ddot{\underline{r}}$ المشتق الثاني لشعاع الموضع $\underline{r}$ بالنسبة الى الزمن t و $\underline{F}$ القوة المؤثرة عليها . يُعَّد القانون (1.1) (بالاضافة الى قانون التجاذب الكوني) اهم قوانين الميكانيك الكلاسيكي . وقد وُفِّقت هذه النظرية في شرح حركة الكواكب

وأعطت وصفا دقيقا لحركة الاجسام الماكروسكوبية المعتدلة الشحنة. ان النقطة الجوهرية في هذه النظرية هو معاملة المادة كمجموعة نقاط مادية ذات كتل معينة ومواضع معينة . تعود صياغة الميكانيك الكلاسيكي بالشكل السابق الى العالم الانكليزي "ايزاك نيوتن" (1542 - 1627) .

بما ان المعادلة (1.1) معادلة شعاعية لذلك فهي تكافىء ثلاث معادلات تفاضلية تنتج بالاسقاط على محاور ثلاثية متعامدة $0xyz$. يحدد حل هذه المعادلات بالنسبة الى الزمن ، وبحسب الشروط الابتدائية (أى الموضع الابتدائي والسرعة الابتدائية) يحدد وضعية الجسيم (النقطة المادية) الحركية او حالته الحركية من اجل كل لحظات الماضي والمستقبل . لاحظ هذه الحتمية الملازمة للميكانيك الكلاسيكي ، اذا يحكم الماضي الحاضر والمستقبل، ويستنتج الماضي والمستقبل الحركي لجسيم من حالته الحركية الحاضرة .

تمرين : اكتب معادلات الحركة لجسيم حر كتلته m ثم استنتج حلولها ؟ .

ان تفريق المعادلة (1.1) الى ثلاثة معادلات امر بسيط عندما تكون الجملة حرة والاحداثيات المستعملة ديكارتية متعامدة . لكن في أغلب الاحيان ، يفرض تناظر المسألة أو القيود الهندسية المفروضة استعمال جملة احداثيات ابسط ، فمثلا في حالة جسيم يتحرك تحت تأثير قوة تتجه نحو مركز ثابت وتتوقف فقط على المسافة بين الجسيم والمركز تصبح الاحداثيات الكروية (القطبية) انسب جملة احداثية للاستعمال، اذ يجب أن يعكس الحل تناظر المسألة المطروحة وهو ما يمكن التعبير عنه بأفضل صورة في الاحداثيات الكروية . لهذا السبب يصبح من المرغوب فيه ان تصاغ قوانين الميكانيك الكلاسيكي بشكل يمكن تطبيقه مباشرة في أية جملة احداثية .

§ 2 . الاحداثيات المعممة ومعادلات لاغرانج

لنعتبر جملة ميكانيكية مؤلفة من n جسيما طليقا ، ومن ثم يكون لهذه الجملة $3n$ درجة من الحرية . يمكننا ان نختار اية مجموعة مناسبة من الاحداثيات q_i $(i=1,2,...,3n)$ لوصف الجملة . ترتبط هذه المجموعة بال $3n$ احداثية ديكارتية بالعلاقات :

$$x_j = x_j(q_1, q_2, \ldots, q_{3n}, t)$$

$$y_j = y_j(q_1, q_2, \ldots, q_{3n}, t) \quad (j = 1, 2, \ldots, n) \qquad (2.1)$$

$$z_j = z_j(q_1, q_2, \ldots, q_{3n}, t)$$

وبصورة اكثر ايجازا بالعلاقات+:

$$\underline{r}_j = \underline{r}_j(q_i, t) \qquad (j = 1, 2, \ldots, n;\ i = 1, 2, \ldots, 3n) \qquad (2.2)$$

تحتوي المعادلات التي تربط مجموعتي الاحداثيات على الزمن صراحة. اما في الحالة التي نلجأ فيها الى تغيير مجموعة ثابتة من الاحداثيات الديكارتية الى مجموعة احداثيات ثابتة اخرى (مثلا الاحداثيات القطبية) ، فان التابعية الصريحة للزمن في العلاقات السابقة تزول .

+ يجب ان تعرف علاقات التحويل (2.1) تقابلا (تطبيقا 1-1 على) قابلا للاشتقاق ومقلوبة قابل للاشتقاق (يسمى هذا التطبيق دفيومورفيسم) . يتحقق هذا الشرط اذا كان معين جاكوبي $|\partial x_k/\partial q_j|$ يختلف عن الصفر عند كل نقطة من الفراغ .

برغم انه يمكن تعويض علاقات التحويل (2.1) في معادلة التحريك (1.1)، الا أن المعادلات الناتجة معقدة وصعبة الحل . ولهذا السبب برزت الحاجة الى ايجاد تكنيك رياضي شامل له القدرة تحت فروض معينة ان يعطي المعادلة (1.1) كمعادلة مشتقة منه. تحقق طريقة التغيير (الطريقة التراوحية) المتطلبات السابقة وتقود الى نتائج قابلة للتطبيق في الجمل الاحداثية كافة .

§(2.1) طريقة التغيير

لنعتبر تابعا $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ في الاحداثيات المعممة q_i والسرع المعممة $\dot{q}_i$ والزمن t . ولنفترض انه قد تم اختيار التوابع $q_i(t)$ حيث تجعل التكامل S المعرف بالعلاقة

$$S \equiv \int_{t_1}^{t_2} L\, dt \qquad (2.3)$$

في قيمة حدية (عظمى او صغرى) . تؤخذ t_1 و t_2 لحظتين زمنيتين ثابتتين . يُعبَّر عن الشرط السابق في اختيار $q_i(t)$ ، بقولنا ان تغييرا صغيرا كيفيا δq_i في التابع $q_i(t)$ لا يغير قيمة التكامل السابق . ونفترض ان التغييرات δq_i تنعدم من اجل t_1 و t_2 ، أي عند طرفي مسار التكامل . وبلغة حساب التغيير نكتب

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L\, dt = \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) dt = 0 \qquad (2.4)$$

ان التوابع $\dot{q}_i$ ليست مستقلة عن q_i ولذلك يكون

$$\delta \dot{q}_i = \frac{d}{dt}(\delta q_i) \qquad (2.5)$$

يكامل الحد الثاني الواقع ضمن القوسين في (2.4) بالتجزئة

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i\, dt = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{d}{dt} \delta q_i\, dt = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) \delta q_i\, dt \qquad (2.6)$$

وبما ان التغييرات δq_i تنعدم عند t_1 و t_2 لذلك نجد

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i\, dt = -\int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) \delta q_i\, dt \qquad (2.7)$$

بالاستفادة من هذه العبارة نكتب (2.4) بالشكل :

$$\sum_i \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) \right] \delta q_i\, dt = 0 \qquad (2.8)$$

بما ان التغييرات δq_i كيفية ، فان المعادلة السابقة تتحقق فقط اذا كانت العبارات الموجودة ضمن القوسين المتوسطين معدومة

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = 0 \qquad i = 1, 2, \ldots, 3n \qquad (2.9)$$

تسمى المعادلات السابقة معادلات اولر في حساب التغيير (او الحساب التراوحي) وهي تمثل جملة من المعادلات التفاضلية تعين حلولها التوابع $q_i(t)$ بشكل يصبح فيه التكامل S أصغريا او اعظميا. نلفت الانتباه الى ان المشتقات الجزئية في (2.9) يجب ان تُشكّل وكأن q_i و $\dot{q}_i$ متحولات مستقلة .

§ (2.2) معادلات لاغرانج في الحركة

لتكن لدينا جملة تتحرك بتأثير حقل قوى $\underline{F}$. نقول عن حقل القوى $\underline{F}$ انه محافظ ، (وتوصف الجملة ايضا بانها محافظة) أو انه يشتق من كمون V ، اذا وجد تابع سلمي V يحقق العلاقة

$$- dV = \underline{F} \cdot d\underline{r}$$

$$\Rightarrow V = - \nabla V \qquad (2.10)$$

يمكن ان نكتب قانون التحريك الثاني من اجل جملة محافظة (في الاحداثيات الديكارتية) بالشكل

$$m_i \ddot{r}_i = -\nabla V \Leftrightarrow \begin{matrix} m_i \ddot{x}_i + \partial V/\partial x_i = 0 \\ m_i \ddot{y}_i + \partial V/\partial y_i = 0 \\ m_i \ddot{z}_i + \partial V/\partial z_i = 0 \end{matrix} \qquad (2.11)$$

وللحصول على هذه المعادلات من (2.9) يكفي ان نفرض أن

$$L = \sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{\underline{r}}_i^2 - V(\underline{r}_i, t) \qquad (2.12)$$

وبهذا الاختيار لـ L تنطبق معادلات لاغرانج (2.9) على معادلات نيوتن (2.11).

تعرف المعادلات (2.9) حيث تم اختيار L فيها بالعلاقة

$$L = T - V \qquad (2.13)$$

حيث T الطاقة الحركية للجملة و V طاقتها الكامنة بمعادلات لاغرانج في الحركة، ويعرف التابع L المعطى بالعلاقة (2.13) بتابع لاغرانج او اللاغرانجيان ، ويسمى S الفعل .

تتم حركة الجملة على مسار $(x_i(t), y_i(t), z_i(t))$ يتحدد بمعادلات نيوتن (2.11)، وبما ان هذه المعادلات هي معادلات لاغرانج (2.9) ايضا ، لذلك تجعل التوابع $(x_i(t), y_i(t), z_i(t))$ الفعل S اصغريا . اذا غيرنا جملة الاحداثيات الى جملة معممة q_i $(i=1,2,\dots,3n)$ ظلت الحركة تتم على المسار نفسه موصوفا في

الجملة الجديدة بالتوابع $q_i(t)$ وبقي الفعل S اصفريا ، وشرط كون الفعل اصفريا هو تحقق معادلات لاغرانج (2.9) . بناء على هذا نرى ان معادلات لاغرانج (2.9) تؤلف الشكل المرغوب فيه لمعادلات الحركة في جملة احداثيات كيفية .

يمكن ان توضع معادلات لاغرانج في الحركة ايضا على الشكل (2.9) عندما تكون الجملة غير محافظة ولكن يمكن فيها الحصول على القوى المعممة (وهي مركبات القوة في اتجاه الاحداثيات المعممة) بدءا من تابع $U(q_i, \dot{q}_i)$ بالعلاقات

$$F_j = -\frac{\partial U}{\partial q_j} + \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial U}{\partial \dot{q}_j}\right) \tag{2.14}$$

يسمى التابع U الذى يتبع الاحداثيات والسرع المعممة والمحقق للعلاقة السابقة الكمون المعمم . ويأخذ اللاغرانجيان في هذه الحالة الشكل

$$L = T - U \tag{2.15}$$

من الامثلة المهمة على القوى التابعة للسرعة هي قوة لابلاس ـ لورنتز التي تؤثر في شحنة نقطية q في حقل كهرطيسي :

$$\underline{F} = q(\underline{\mathcal{E}} + \underline{v} \times \underline{B}) \tag{2.16}$$

يعبر عن الحقلين الكهربائي والمغناطيسي $\underline{\mathcal{E}}$ و $\underline{B}$ بدلالة الكمونين السلمي ϕ والشعاعي $\underline{A}$

$$\begin{aligned} \underline{\mathcal{E}} &= -\nabla\phi - \partial \underline{A}/\partial t \\ \underline{B} &= \nabla \times \underline{A} \end{aligned} \tag{2.17}$$

لا تعين هاتان المعادلتان ϕ و $\underline{A}$ بصورة وحيدة ، لكن معادلات ماكسويل مكتوبة بدلالة $\underline{A}$ و ϕ تأخذ ابسط صورها اذا ارتبط الكمونان السلمي والشعاعي بشرط لورنتز

$$\nabla \cdot \underline{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \tag{2.18}$$

من المعادلتين (2.16) و (2.17) نجد أن

$$\underline{F} = q\left\{-\nabla\phi - \left[\frac{\partial \underline{A}}{\partial t} - \underline{v} \times (\nabla \times \underline{A})\right]\right\}. \tag{2.19}$$

وبما أن

$$\frac{d\underline{A}}{dt} = \frac{\partial \underline{A}}{\partial t} + (\underline{v}\cdot\nabla)\,\underline{A} \tag{2.20}$$

$$\underline{v}\times(\nabla\times\underline{A}) = \nabla(\underline{v}\cdot\underline{A}) - (\underline{v}\cdot\nabla)\,\underline{A} \tag{2.21}$$

لذلك نجد أن الحد الموجود في القوسين المتوسطين في (2.19) يؤول الى

$$\frac{d\underline{A}}{dt} - \nabla(\underline{v}\cdot\underline{A})\,.$$

ولذلك تُكتب (2.19) بالشكل

$$F = q\,[-\nabla(\phi - \underline{v}\cdot\underline{A}) - \frac{d\underline{A}}{dt}]\,. \tag{2.22}$$

لنعتبر مثلا المركبة x للقوة ، فنجد أنها تكتب بالاعتماد على (2.22) وعلى حقيقة استقلالية $\underline{A}$ و ϕ عن السرعة $\underline{v}$ ،كما يلي

$$\begin{aligned} F_x &= q\{-\frac{\partial}{\partial x}(\phi - \underline{v}\cdot\underline{A}) - dA_x/dt\} \\ &= q\{-\frac{\partial}{\partial x}(\phi - \underline{v}\cdot\underline{A}) + \frac{d}{dt}[\frac{\partial}{\partial v_x}(\phi - \underline{v}\cdot\underline{A})]\} \end{aligned} \tag{2.23}$$

تظهر العلاقة الاخيرة انه باختيار الكمون المعمم بالشكل

$$U \equiv q(\phi - \underline{v}\cdot\underline{A}) \tag{2.24}$$

يصبح اللاغرانجيان

$$L = T - q\phi + q\,\underline{v}\cdot\underline{A} \tag{2.25}$$

٣ع . صياغة هاميلتون

تؤلف معادلات لاغرانج $3n$ معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية في $3n$ احداثية معممة ، وحل هذه المعادلات يعطي تابعية الاحداثيات المعممة للزمن t وبدلالة $6n$ ثابتة كيفية تتعين من شروط البدء وهي قيم الاحداثيات المعممة والسرع المعممة في لحظة ما .

في صياغة هاميلتون ندخل بالاضافة الى الـ $3n$ احداثية معممة $3n$ متحولا جديدا مما يؤدى الى وصف حركة الجملة بـ $6n$ معادلة تفاضلية من المرتبة الاولى .

من أجل جملة محافظة يعطى اللاغرانجيان في الاحداثيات الديكارتيةبالعلاقة

$$L = \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{2} m_k \dot{\underline{r}}_k^2 - V(\underline{r}_1, \ldots, \underline{r}_n, t) \quad (3.1)$$

ومن الواضح ان الدفوع الديكارتية تساوى

$$\begin{aligned} p_{kx} &= m_k \dot{x}_k = \partial L/\partial \dot{x}_k \\ p_{ky} &= m_k \dot{y}_k = \partial L/\partial \dot{y}_k \quad (3.2) \\ p_{kz} &= m_k \dot{z}_k = \partial L/\partial \dot{z}_k \end{aligned}$$

تقترح هذه العلاقات تعريف دفوع معممة من الشكل

$$p_i = \partial L/\partial \dot{q}_i \quad (3.3)$$

ننظر وفق صياغة هاميلتون للتحريك الى الدفوع المعممة p_i على انها متحولات مستقلة وعلى قدم المساواة بالاحداثيات المعممة q_i . تسمى المتحولات q_i و p_i وعددها $6n$ متحولا ، المتحولات القانونية ، يعرف تابع هاميلتون بالعلاقة

$$H = \sum_{i=1}^{3n} \dot{q}_i p_i - L(q_j, \dot{q}_j, t) \quad (3.4)$$

بما ان L يتبع q_j و $\dot{q}_j$ و t فكذلك تكون p_i المعرفة بالعلاقة (3.3) . وبحل (3.3) من اجل $\dot{q}_i$ وبدلالة q_i و p_i و t ثم التعويض في (3.4) نجد

$$H = H(q_i, p_i, t) \quad (3.5)$$

بمفاضلة هذه العلاقة نجد

$$dH = \sum_{k=1}^{3n} \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i\right) + \frac{\partial H}{\partial t} dt \quad (3.6)$$

ومن وجهة نظر اخرى ، وبحسب (3.4) نجد أن

$$dH = \sum_{i=1}^{3n} \left(\dot{q}_i dp_i + p_i d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i\right) + \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (3.7)$$

يختصر الحدان الثاني والرابع تحت اشارة الجمع بحسب التعريف (3.3).ومن معادلات لاغرانج ومن التعريف (3.3) ايضا ، نجد

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = \frac{d}{dt} p_i = \dot{p}_i \quad (3.8)$$

وبتعويض هذه القيمة في الحد الثالث تحت اشارة المجموع في (3.7) نجد أن

$$dH = \sum_{i=1}^{3n} (\dot{q}_i \, dp_i - \dot{p}_i \, dq_i) + \frac{\partial L}{\partial t} dt \tag{3.9}$$

وبمطابقة امثال التفاضلات المستقلة dq_i و dp_i و dt في (3.9)و(3.6)نجد أن

$$\partial L/\partial t = \partial H/\partial t$$

$$\dot{q}_i = \partial H/\partial p_i \quad , \quad \dot{p}_i = -\partial H/\partial q_i \tag{3.10}$$

تعرف المعادلات(3.10) باسم المعادلات القانونية في الحركة او معادلات هاميلتون .

من اجل جملة ديناميكية محافظة ومجموعة احداثيات q_i ،لا يظهر الزمن في العلاقات (2.1) التي تعرّفها ،تصبح الطاقة الكامنة T تابعا تربيعيا متجانسا في السرع المعممة $\dot{q}_i$. أى

$$T = \sum_{i,j=1}^{3n} Q_{ij} \, \dot{q}_i \, \dot{q}_j \tag{3.11}$$

حيث ان Q_{ij} توابع في الاحداثيات المعممة فقط . لاحظ انه يمكن أن نأخذ ودون فقدان صفة العمومية ، التوابع Q_{ij} متناظرة في i و j . أى $Q_{ij} = Q_{ji}$.
وبما ان الجملة محافظة نجد من (3.3) و (2.13) أن

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial (T-V)}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \tag{3.12}$$

ومن (3.11) يكون

$$p_i = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = \sum_{j=1}^{3n} 2 \, Q_{ij} \, \dot{q}_j \tag{3.13}$$

واستنادا الى هذا يكون

$$\sum_{i=1}^{3n} \dot{q}_i \, p_i = \sum_{i=1}^{3n} \sum_{j=1}^{3n} 2 \, Q_{ij} \, \dot{q}_i \, \dot{q}_j \tag{3.14}$$

وهكذا نجد

$$H = \sum_{i=1}^{3n} p_i \dot{q}_i - L = 2T - (T-V) = T+V \tag{3.15}$$

اذن فعندما تكون الجملة محافظة والاحداثيات المعممة مستقلة عن الزمن يكون تابع هاميلتون مساويا للطاقة الكلية للجملة .

تمرين: استنتج عبارة الطاقة الحركية لجسيم حر في الاحداثيات المعممة ، ثم حدد التوابع Q_{ij} في الاحداثيات القطبية .

الحل: يعطى مربع عنصر المسافة بين نقطتين متجاورتين في الفراغ في جملة احداثيات معممة q_i بالعلاقة

$$(ds)^2 = \sum_{i,j} g_{ij}\, dq_i\, dq_j \qquad (3.16)$$

ويكون مربع السرعة

$$v^2 = \left(\frac{ds}{dt}\right)^2 = \sum_{i,j} g_{ij} \frac{dq_i}{dt} \frac{dq_j}{dt} \qquad (3.17)$$

ولذلك تكون الطاقة الحركية

$$T = \frac{1}{2} m v^2 = \sum_{i,j} \left(\frac{1}{2} m g_{ij}\right) \dot{q}_i \dot{q}_j \qquad (3.18)$$

في الاحداثيات القطبية يكون

$$ds^2 = dr^2 + r^2 \sin^2\theta\, d\phi^2 + r^2 d\theta^2 \qquad (3.19)$$

ويكون اذن

$$T = \frac{1}{2m} \left(\dot{r}^2 + r^2 \sin^2\theta\, \dot{\phi}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 \right) \qquad (3.20)$$

$$\Rightarrow Q_{11} = (1/2m)\,,\ Q_{22} = r^2 \sin^2\theta / 2m\,,\ Q_{33} = r^2/2m$$

$$Q_{ij} = 0 \quad if \quad i \neq j .$$

تمرين : اكتب تابع هاميلتون المتعلق بحركة شحنة في حقل كهرطيسي .

الحل : وجدنا من قبل تابع لاغرانج المتعلق بحركة شحنة في حقل كهرطيسي .

$$L = T - q\phi + q\,\underline{v} \cdot \underline{A} \qquad (3.21)$$

وفيه نجد في الاحداثيات الديكارتية

$$p_x = \partial L / \partial v_x = m v_x + q A_x \ ;\ p_y = \ldots\ etc \qquad (3.22)$$

وبصورة شعاعية يكون لدينا

$$\underline{p} = m\underline{v} + q\,\underline{A} \qquad (3.23)$$

فالدفع القانوني اذن لم يعد الدفع المألوف (كمية الحركة) $m\underline{v}$. وحسب (3.21)

يكون تابع هاميلتون

$$H = \underline{v}\cdot\underline{p} - L$$

$$= \underline{v}\cdot\underline{p} - \frac{1}{2}mv^2 + q\phi - q\,\underline{v}\cdot\underline{A} \qquad (3.24)$$

وبتعويض $\underline{v}$ بقيمتها من (3.23) نجد أن

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\underline{P} - q\,\underline{A})^2 + q\,\phi \qquad (3.25)$$

§4. معترضات بواصون وثابت الحركة

اذا كان F و G تابعين في المتحولات القانونية فانا نعرف معترضة بواصون $\{F, G\}$ لهذين التابعين بالعلاقة

$$\{F, G\} = \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q_i}\right) \qquad (3.26)$$

لكي نرى كيف تبرز هذه المعترضة ، نعتبر تابعا F في المتحولات القانونية والزمن أو مانسميه ملحوظا فيزيائيا . يكتب المشتق الزمني لهذا التابع بالشكل

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i}\dot{p}_i\right)$$

$$= \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) \quad \text{((3.10) بحسب)}$$

$$= \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\} \qquad (3.27)$$

وهو وضوحا شكل موجز في كتابة معادلة حركة F . تشكل معترضة بواصون كواشف لثوابت الحركة ، فاذا كان

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\{F, H\}$$

كان F ثابتا للحركة ، لانه بحسب (3.27) يكون dF/dt معدوما . اذا كان F لا يتعلق صراحة بالزمن فانه يكون ثابتا للحركة اذا انعدمت معترضة بواصون له مع الهاميلتوني . أى أن

$$F \text{ ثابت للحركة} \iff \{F, H\} = 0 \qquad (3.29)$$

من السهل البرهان على ان المتحولات القانونية تحقق معترضان بواصون التالية :

$$\{q_i, q_j\} = 0 \quad , \{p_i, p_j\} = 0 \quad , \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \tag{3.30}$$

بالحقيقة تؤلف معترضات بواصون نقطة الانطلاق نحو صياغة ميكانيك الكم ، اذ نستبدل في ميكانيك الكم معترضة لي Lie bracket بمعترضة بواصون ، وتمثل المتحولات القانونية بمؤثرات تحقق معترضات لي الخاصة بها علاقات شبيهة بالعلاقات (3.30) .

من السهل البرهان على ان معترضات بواصون تحقق الخواص التالية :

$$\begin{aligned} &\{F, G\} = -\{G, F\} \\ &\{E+F, G\} = \{E, G\} + \{F, G\} \\ &\{E, FG\} = F\{E, G\} + \{E, F\} G \\ &\{E, \{F, G\}\} + \{F, \{G, E\}\} + \{G, \{E, F\}\} = 0 \end{aligned} \tag{3.31}$$

تمرين 1 : برهن على صحة الخواص السابقة .

تمرين 2 : برهن ان معترضات بواصون تحقق الخواص التالية :

$$\{F, F\} = 0 \quad , \quad \{F, c\} = 0 \quad (c \in \mathbb{R}) \tag{7.32}$$

تمرين 3 : برهن انه اذا اخذنا في (3.27) $F = q_i$ و $G = p_i$ على التوالي فاننا نحصل على المعادلات القانونية للحركة

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad , \quad \dot{p}_i = \{p_i, H\} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{7.33}$$

§ 5 . الملحوظات الفيزيائية

ان المقيس او الملحوظ الفيزيائي هو أية كمية فيزيائية متعلقة بالجملة الميكانيكية المدروسة وتقبل القياس ، مثل المتحولات القانونية q_i و p_i أو أي تابع فيهما $F(q_i, p_i)$. ويمكن F ان يتبع الزمن ايضا .

من المقيسات المتعلقة بجسيم معبر عنها في الاحداثيات الديكارتية المتعامدة الطاقة الكامنة $V(x,y,z)$ والطاقة الحركية $T = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$ والطاقة

الكلية $E=T+V$ والعزم الحركي (الزاوي angular momentum)

$$\underline{L}=(yp_z-zp_y)i+(zp_x-xp_z)j+(xp_y-yp_x)k$$

يجب ان نلاحظ ان القياس المتواقت للمتحولات القانونية q_i و p_i يمكن اجراؤه من حيث المبدأ بدقة كاملة . ينتج لدينا اذن انه يمكن قياس أية مجموعة من الملحوظات الديناميكية الكلاسيكية بدقة كاملة مادامت بحسب تعريفها توابع في المتحولات القانونية.

§6. معادلة جاكوبي

نعتبر هنا ان التغيير يشمل النقطة $q_i(t)$ $(i=1,2,\dots,3n)$ في فراغ التمثيل في اللحظة t_2 . بعبارة ثانية ، نعتبر مجموعة حركات حقيقية تتم بين لحظتين t_1 و t_2 على مسارات مختلفة تبدأ جميعا من $q_i(t_1)$ ولكنها تنتهي عند نقاط مختلفة $q_i(t_2)+\delta q_i(t_2)$. ويكون تغيير الفعل لدى الانتقال من مسار الى آخر معطى بحسب (2.4) و (2.6) بالعلاقة

$$\delta S=\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta q_i\Big|_{t_1}^{t_2}+\int_{t_1}^{t_2}\sum_i\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\delta q_i\,dt \qquad (6.1)$$

وبما ان المسارات الحقيقية للحركة تحقق معادلات لاغرانج لذلك تنعدم جميع الحدود الواقعة تحت رمز التكامل ، ويكون

$$\delta S=\sum_{i=1}^{3n}\left\{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta q_i(t_2)-\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta q_i(t_1)\right\}$$

$$\Rightarrow \delta S=\sum_{i=1}^{3n}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta q_i(t_2)=\sum_{i=1}^{3n}p_i\,\delta q_i(t_2)$$

وبما ان t_2 كيفية لذلك نجد

$$\delta S=\sum_{i=1}^{3n}p_i\,\delta q_i \Rightarrow \partial S/\partial q_i=p_i \qquad (6.2)$$

يمكن ايضا ،ان نعتبر الفعل تابعا في الزمن ، وندرس الحركات التي تتم على مسارات تبدأ في لحظة t_1 من النقطة $q_i(t_1)$ في فراغ التمثيل وتنتهي في النقطة $q_i^{(2)}$ في لحظات زمنية مختلفة . أي ان التغيير هنا يشمل الزمن ايضا ولكنه يُبقي على نقطتي البدء والنهاية لمسار الفعل ثابتتان . بحسب تعريف الفعل يكون :

$$dS/dt = L \tag{6.3}$$

واذا نظرنا الى الفعل كتابع في الاحداثيات والزمن نجد

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i}\dot{q}_i = \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_i p_i \dot{q}_i \tag{6.4}$$

وذلك بحسب (3.3) . وبالاستفادة من (6.3) نجد

$$\frac{\partial S}{\partial t} = L - \sum_i p_i \dot{q}_i = - H \tag{6.5}$$

نعبر عن (6.2) و (6.5) معا بالمعادلة

$$dS = \sum_i p_i dq_i - H dt \tag{6.6}$$

وتدل هذه المعادلة على انه يمكن التعبير عن الفعل كتابع في الاحداثيات والزمن فقط .

تكتب المعادلة (6.5) بالشكل

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(q_i, p_i, t) = 0 \tag{6.7}$$

وبالاستفادة من (6.2) نعوض الدفوع p_i بقيمها $\partial S/\partial q_i$ في (6.7) لنحصل على معادلة هاميلتون جاكوبي

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}, t\right) = 0 \tag{6.8}$$

وهي معادلة تفاضلية جزئية من المرتبة الاولى .

§ 7. التحويلات القانونية

في حل مسألة ما ، يؤشر تناظر المسألة المطروحة على الجملة الاحداثية الواجب استخدامها . وبرغم ان التحويل من جملة احداثيات q_i الى جملة اخرى Q_i أمر مباشر ، الا ان العملية تصبح اكثر صعوبة عندما نعمل في صياغة هاميلتون حيث تعتبر فيها الدفوع كالاحداثيات متحولات مستقلة . ومانريده في هذه الحالة هو " تحويلات قانونية " اى تحويلات تبقي على شكل معادلات الحركة (3.10) دون تغيير . وتسمى ايضا تحويلات كهذه " تحويلات الصلة " .

Contact تحويلات

من أجل تعريف متحولات قانونية جديدة Q_i و P_i لتحل محل المتحولات الاصلية q_i و p_i يجب ادخال $2N=6n$ متحولا اضافيا . ومن الواضح انه من بين المتحولات q_i و p_i و Q_i و P_i وعددها $4N$ يمكن أن يكون $2N$ متحولا فقط مستقلاً. وعليه فانه يجب التعبير عن $2N$ متحولا بدلالة المتحولات ال $2N$ الباقية.اذا عبرنا عن المتحولات الجديدة Q_i و P_i بدلالة المتحولات القديمة بواسطة توابع كيفية

$$Q_i = Q_i(q_j, p_j, t) \quad , \quad P_i = P_i(q_j, p_j, t) \tag{7.1}$$

فلن تكون المتحولات الجديدة قانونية بشكل عام .

لكن يمكن البرهان انه اذا بدأنا بتابع كيفي قابل للاشتقاق $F(q_i, P_i, t)$ واستعملناه لتعريف متحولات جديدة Q_j، وضمنيا P_j ، ولتعريف تابع K بالعلاقات

$$p_j = \partial F(q_i, P_i, t)/\partial q_j$$
$$Q_j = \partial F(q_i, P_i, t)/\partial P_i \tag{7.2}$$
$$K = H + \partial F(q_i, P_i, t)/\partial t$$

فعندئذ تؤدى التحويلات (7.1) التي نحصل عليها بحل (7.2) بالنسبة الى P_i و Q_i، تؤدي الى تحويلات قانونية ، يكون فيها

$$\dot{Q}_i = \partial K/\partial P_i \quad , \quad \dot{P}_i = -\partial K/\partial Q_i \tag{7.3}$$

يسمى التابع $F(q_i, P_i, t)$ التابع المولد للتحويل . ويلعب التابع الجديد $K(Q_i, P_i, t)$ دور الهاميلتوني في الجملة المحولة .

لقد افترضنا ان تابع التحويل تابعا في الاحداثيات الاصلية q_i والدفوع الجديدة P_i ومن الممكن ايضا استعمال توابع مولدة من الشكل $F_1(q_i, Q_i, t)$ أو $F_2(p_i, P_i, t)$ أو $F_3(p_i, Q_i, t)$. وباختلاف شكل التابع المولد تختلف المعادلات التي تعين التحويل عن (7.2) ولكن يمكن حلها بطريقة مماثلة لتعطي معادلات تحويل من الشكل (7.1) . ان العديد من العبارات لا متغيرة تحت

التحويلات القانونية ومن امثلتها مثلا معترضة بواصون لأى تابعين .

احد الامثلة البسيطة على التابع المولد هو

$$F = \sum_i q_i P_i \qquad (7.4)$$

وفي هذه الحالة نجد بحسب (7.2)

$$p_i = P_i \ , \quad Q_i = q_i \quad , \quad K = H \qquad (7.5)$$

وهذا التحويل يترك الاحداثيات والدفوع دون تغيير ويسمى التحويل المطابق .
Identity transformation

I.C.T من المفاهيم المهمة مفهوم التحويل القانوني اللامتناهي في الصغر، وهو كما (I.C.T — Infinitesimal Canonical transformation)
يدل عليه اسمه ، يُحدِث تغييرا ضئيلا في المتحولات . ولذلك يختلف تابعه المولد
عن التحويل المطابق بتابع لامتناه في الصغر

$$F = \sum_i q_i P_i + \epsilon\, Q(q_i, P_i) \qquad (7.6)$$

حيث ان ϵ ثابت لامتناه في الصغر . يسمى G احيانا التابع المولد (Generator) للتحويل
اللامتناهي في الصغر ، وبحسب (7.2) نجد

$$p_j = P_j + \epsilon\, \partial G(q_i, P_i)/\partial q_j \qquad (7.7)$$

$$Q_j = q_j + \epsilon\, \partial G(q_i, P_j)/\partial P_j \qquad (7.8)$$

وهكذا نرى ان

$$\delta p_j = P_j - p_j = -\epsilon\, \partial G/\partial q_i \qquad (7.9)$$

$$\delta q_j = Q_j - q_j = \epsilon\, \partial G/\partial P_j \qquad (7.10)$$

وبالاقتصار على الحدود من المرتبة الاولى في ϵ ، نرى انه يمكن استبدال P_j في
(7.8) لنجد

$$\delta q_j = \epsilon\, \partial G/\partial p_j \qquad (7.11)$$

حيث نعتبر G الان تابعا في q_i و p_i .

ويكون اثر هذا التحويل في اى تابع $W(q_i, p_i)$ هو احداث تغيير طفيف
معطى بالعلاقة

$$\delta W = \sum_i \left(\frac{\partial W}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial W}{\partial p_i} \delta p_i \right) \qquad (7.12)$$

وبحسب (7.9)و(7.11) نجد

$$\delta W = \epsilon \{W, G\} \qquad (7.13)$$

اى أن التغيـــــــــــــر في التابع W هو معترضة بواصو نله مع التابع المولد G .

***

الفصل الثاني

فراغ التوابع الموجية

سوف نرفق بكل جملة فيزيائية في ميكانيك الكم مجموعة من التوابع الموجية التي تميز الحالات المختلفة للجملة . ويجب ان تحقق هذه التوابع خواص بعض البنى الرياضية لكي يتسنى لنا القيام بعمليات عليها . لقد تعاملنا في مقرر الفيزياء الكمومية وتراكيب خطية في التوابع الموجية مما يدل على أن هذه التوابع يجب أن تؤلف فراغا شعاعيا . وتحدثنا آنئذ عن طويلة تابع موجي وتعامد تابعين موجيين مما يعني أن لهذه التوابع بنية فراغ جداء داخلي منظم ايضا . من أجل اعتبارات اخرى لن نهتم بها كثيرا في هذا المقرر، يجب ان تؤلف التوابع الموجية فراغ هلبرت أي فراغ جداء داخلي تام قابل للفصل . وسوف توضح الاعتبارات الفيزيائية ضرورة تحقيق فراغ التوابع الموجية لخواص هذه البنى الرياضية المذكورة آنفا .

سوف نبدأ اولا بدراسة بنية هذه الفراغات وخواصها ، وهي بلا شك اداة فعالة لا غنى عنها من أجل فهم وصياغة مشاكل ميكانيك الكم واساليبه . نذكر القارئ أنه بامكانه تجاوز الابحاث التي اشرنا اليها بحرف لاتيني دون ان يكون لذلك أثر على السياق العام تقريبا ، وبامكانه العودة اليها عند الحاجة فقط ، وهي غالبا ذات صفة رياضية . كما يمكن القارئ ايضا تجاوز الفقرات التي دل عليها بالرمز (*) او المرور بها مرورا سريعا ، وذلك بسبب طبيعتها التفصيلية او لأن الابحاث اللاحقة لها يمكن معالجتها بمعرفة فكرة بسيطة عن هذه الفقرات .

§١. الفراغ الشعاعي :

تعريف : نقول عن مجموعة $V = \{f, g, h, \ldots\}$ انها تؤلف فراغا شعاعيا ونرمز

الى عناصرها بالرموز $\underline{f}$ و $\underline{g}$ و $\underline{h}$ و . . . اذا كان :

معرفاعليها عمليــــة تشكيل داخلي + تقابل وفقها كل زوج مرتب $(\underline{f},\underline{g}) \in V \times V$ بعنصر وحيد $\underline{h} \in V$ حيث $\underline{f}+\underline{g}=\underline{h}\in V$ حيث تؤلف V زمرة تبديلية بالنسبة الى + ، أى تحقق المسلمات التالية :

P_1 : العملية + تجميعية ($(\underline{f}+\underline{g})+\underline{h} = \underline{f}+(\underline{g}+\underline{h})$

P_2 : يوجد عنصر $\underline{0} \in V$ يسمى العنصر المطابق (او المحايد) معرف كما يلي :

$$\underline{f}+\underline{0} = \underline{0}+\underline{f} = \underline{f} \qquad \forall \underline{f}$$

لكل عنصر $\underline{f} \in V$ نظير (او مقلوب) $-\underline{f}$ واقع في V ومعرف كما يلي

$$\underline{f}+(-\underline{f}) = (-\underline{f})+(\underline{f}) = \underline{0}$$

العملية + تبديلية $\qquad \underline{f}+\underline{g} = \underline{g}+\underline{f}$

وذلك من أجل كل $\underline{f}$ و $\underline{g}$ و $\underline{h}$ من V $\quad (\forall\, \underline{f}, \underline{g}, \underline{h} \in V)$

٢ . معرفا على V عملية ضرب بعدد مركب حيث تتحقق المسلمات المذكورة فيمـــا يلي، وذلك من أجل كل $\underline{f}$ و $\underline{g}$ من V وكل λ و μ من مجموعة الاعـــداد المركبة $\mathbb{C}$:

P_5 : $\lambda \underline{f} = \underline{h} \in V$ $\qquad$ P_6 : $(\lambda\mu)\underline{f} = \lambda(\mu \underline{f})$

P_7 : $1.\underline{f} = \underline{f}$ $\qquad$ P_8 : $\lambda(\underline{f}+\underline{g}) = \lambda\underline{f}+\lambda\underline{g}$

P_9 : $(\lambda+\mu)\underline{f} = \lambda\underline{f}+\mu\underline{f}$.

اذا كانت الكمية السلمية ، التي نعرف الضرب على V بالنسبة اليهـا ، عددا مركبـا قلنا ان V فراغ شعاعي مركب ، واذا كانت عددا حقيقيا قلنا ان V فراغ شعاعـي حقيقي . يمكن بشكل عام تعريف فراغ شعاعي على حقل $\mathbb{K}$ وذلك بتعريف عمليـــة ضرب عناصر V بكمية سلمية من $\mathbb{K}$ حيث تتحقق المسلمات السابقة $P_5 - P_9$. ان الفراغين الشعاعيين الحقيقي والمركب يوافقان على الترتيب $\mathbb{K}=\mathbb{R}$ و $\mathbb{K}=\mathbb{C}$.

تسمى عناصر فراغ شعاعي اشعة وقد يسمى الفراغ الشعاعي احيانا فراغا خطيا .

§ (1.2) حقائـــق :

- العنصر المحايد $\underline{0}$ في فراغ شعاعي (او في زمرة) وحيد .
- نظير كل عنصر في فراغ شعاعي (او في زمرة) وحيـــــــد .
- بفرض ان V فراغ شعاعي يكون لدينا

$$-1\underline{f} = \qquad 0\underline{f} = \underline{0} \quad (0 \in \mathbb{C}\ ,\ \underline{0} \in V)$$

(سوف نهمل الخط الذى نضعه تحت عناصر V للدلالة على أنها اشعة ، وسيدل السياق او المعادلة على طبيعة رموزنا) .

§ (1.3) تعاريف ونظريات :

تنشأ بنية الفراغ الشعاعي من مجموعة عُرِّف عليها عملية تشكيل داخلي وعمليـــــة ضرب بكمية سلمية (عدد مركب) شرط ان تتحقق المسلمات المذكورة آنفا . بناء علـى هذا تكون عبارة خطية في عناصر من الفراغ

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \psi_i \qquad (\lambda_i \in \mathbb{C}\ ,\ \psi_i \in V)$$

معرفة تمامـا .

1• تعريف : نقول عن مجموعة جزئية $\{\psi_1, \psi_2, \psi_3, \ldots\}$ من فراغ شعاعي V إنها مستقلة خطيا اذا كان

$$\sum_{i} \lambda_i \psi_i = \underline{0} \quad \Rightarrow \lambda_i = 0 \quad (\forall i = 1, 2, 3, \ldots)$$

يكافىء التعريف السابق القول بأنه لا يمكن التعبير عن اى عنصر من عناصر هـــــــذه المجموعة بدلالة العناصر المتبقية (برهن ذلك)

اذا لم تكن مجموعة جزئية من الفراغ الشعاعي V مستقلة خطيا قيل انهـا مرتبطة خطيا . في هذه الحالة يمكن ان تتحقق العلاقة السابقة دون ان تكون جميع الامثال λ_i معدومة . أي توجد اعداد λ_1 و λ_2 و . . . بعضها غير معدوم حيث يكون

$$\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 + \lambda_3 \psi_3 + \cdots = \underline{0}$$

اذا كان $\lambda_1 \neq 0$ امكن التعبير عن ψ_1 بدلالة العناصر المتبقية

$$\psi_1 = - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \psi_2 - \frac{\lambda_3}{\lambda_1} \psi_3 - \cdots$$

2 . لتكن $B = \{\psi_1 ; \psi_2 , \ldots \}$ مستقلة خطيا وليكن $\phi \in V$. اذا امكن التعبير عن ϕ بدلالة عناصر B فان ذلك يتم بصورة وحيدة . بعبارة ثانية ، توجد مجموعة وحيدة من الاعداد المركبة $\{\lambda_1 , \lambda_2 , \ldots \}$ حيث يكون

$$\phi = \sum_i \lambda_i \psi_i$$

(برهن على ذلك . هل يمكن بالضرورة التعبير عن ϕ بدلالة عناصر B) .

3 . ليكن V فراغا شعاعيا ولتكن $B = \{\psi_1 , \psi_2 , \ldots \}$ مستقلة خطيا . نقول عن B انها مجموعة كاملة في V اذا امكن التعبير عن كل عنصر من V بدلالة عناصر B ، اذا كان عدد عناصر B منتهيا ، وليكن N مثلا ، قيل ان الفراغ منتهي البعد وان بعده هو N . نرمز الى الفراغ في هذه الحالة بالرمز V_N ونقول احيانا ان B قاعدة له . اما اذا كان عدد عناصر B غير منته قيل ان الفراغ لا منتهي البعد .

4 . اذا كانت B مجموعة كاملة من الاشعة المستقلة خطيا في V فانه يمكن التعبير عن كل عنصر $\phi \in V$ بدلالة عناصر B بشكل وحيد . بعبارة اخرى ، توجد مجموعة وحيدة من الاعداد $\{\lambda_1 , \lambda_2 , \ldots \}$ حيث يكون

$$\phi = \sum_i \lambda_i \psi_i$$

تسمى λ_i مركبة ϕ باتجاه ψ_i ، او مركبة ϕ على ψ_i ، وقد نقول المركبة i للشعاع ϕ ونفهم ضمنا ان المجموعة الكاملة التي ننشر ϕ وفقها معطاة سلفا .

5 . الفراغات الشعاعية الجزئية : لتكن S مجموعة جزئية من فراغ شعاعي V . نقول

ان $\mathcal{S}$ تؤلف فراغا شعاعيا جزئيا من V اذا كان

$$\left.\begin{array}{l}\lambda s \in \mathcal{S} \\ s_1 + s_2 \in \mathcal{S}\end{array}\right\} (\forall s_1, s_2, s \in \mathcal{S}; \forall \lambda \in \mathbb{C}),$$

ومن الواضح ان $\mathcal{S}$ بحد ذاتها تؤلف فراغا شعاعيا (تحقق من ذلك) .

يمكن اجمال الشرطين السابقين بالشرط التالي :

$$\lambda_1 s_1 + \lambda_2 s_2 \in \mathcal{S} \quad (\forall s_1, s_2 \in \mathcal{S}; \forall \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C})$$

6 • ليكن $\mathcal{S} = \{s_1, s_2, \ldots, s_m\} \subset V$ • نرمز الى مجموعة التراكيب الخطية في عناصر $\mathcal{S}$ بالرمز $Lin\,\mathcal{S}$ ، أي :

$$Lin\,\mathcal{S} = \{\sum_{i=1}^{m} \lambda_i s_i \mid \lambda_i \in \mathbb{C}\}$$

من الواضح ان $Lin\,\mathcal{S}$ تؤلف فراغا شعاعيا جزئيا من V ، وهو اصغر فراغ شعاعي جزئي يحتوى $\mathcal{S}$ ، وبعد هذا الفراغ p اصغر او يساوى m $(p \leq m)$.تتحقق المساواة اذا وفقط اذا كانت اشعة $\mathcal{S}$ مستقلة خطيا (برهن ذلك) .

§ 2 . فراغ الجداء الداخلي

تؤلف مجموعة التوابع الموجية ψ فراغا شعاعيا V بالنسبة الى عمليتي :

. جمع التوابع $(\psi_1 + \psi_2)(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$

. الضرب بعدد مركب $(\lambda\psi)(x) = \lambda\,\psi(x)$.

نعرف على هذا الفراغ تطبيقا نرمز اليه بالرمز $\langle\,|\,\rangle$ ونسميه جداء داخليا على V ، تقابل وفقه كل زوج مرتب $(\psi, \varphi) \in V \times V$ بعدد من مجموعة الاعداد المركبة $\mathbb{C}$ وذلك بالطريقة التالية :

$$(\psi, \varphi) \xrightarrow{\langle\,|\,\rangle} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \varphi \, dx$$

وهذا التطبيق يحقق مسلمات الجداء الداخلي التي سننص عليها في التعريف المجرد التالي :

§ (2.1) تعريف :

الجداء الداخلي على فراغ شعاعي V هو تطبيق

$$\langle \ | \ \rangle : V \times V \longrightarrow \mathbb{C}$$
$$(\psi, \varphi) \longrightarrow \langle \psi | \varphi \rangle$$

ويحقق الموضوعات التالية :

P_1 : *-متناظر (او متناظر مائل) $\langle \psi | \varphi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle^*$

P_2 : جمعي من اليمين $\langle \psi | \varphi_1 + \varphi_2 \rangle = \langle \psi | \varphi_1 \rangle + \langle \psi | \varphi_2 \rangle$

P_3 : متجانس من اليمين $\langle \psi | \lambda \varphi \rangle = \lambda \langle \psi | \varphi \rangle$

(P_2 و P_3 : خطي من اليمين)

P_4 : موجب $\langle \psi | \psi \rangle \geq 0$

P_5 : مؤكد $\langle \psi | \psi \rangle = 0 \iff \psi = \underline{0}$

(P_4 و P_5 : موجب قطعا)

يقال عن فراغ شعاعي معرف عليه جداء داخلي انه فراغ جداء داخلي ونرمز اليه احيانا بالرمز $V, \langle \ | \ \rangle$.

§ (2.2) حقائق :

اذا كان $\langle \ | \ \rangle$ جداء داخليا على V فان

1 . الجداء الداخلي جمعي من اليسار $\langle \psi_1 + \psi_2 | \varphi \rangle = \langle \psi_1 | \varphi \rangle + \langle \psi_2 | \varphi \rangle$

2 . الجداء الداخلي *-متجانس من اليسار $\langle \lambda \psi | \varphi \rangle = \lambda^* \langle \psi | \varphi \rangle$

فالجداء الداخلي اذن *-خطي من اليسار

3 . $\langle \underline{0} | \varphi \rangle = \langle \psi | \underline{0} \rangle = \langle \underline{0} | \underline{0} \rangle = 0$

4 . $\langle \psi | \varphi \rangle = 0 \ (\forall \varphi \in V) \Rightarrow \psi = \underline{0}$

5 . ينتج من (4) ومن موضوعتي الجمعية والتجانس ان

$$\langle \psi_1 | \varphi \rangle = \langle \psi_2 | \varphi \rangle \quad (\forall \varphi \in V) \Rightarrow \psi_1 = \psi_2$$

$$\langle \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \psi_i | \sum_{j=1}^{m} \mu_j \varphi_j \rangle = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} \lambda_i^* \mu_j \langle \psi_i | \varphi_j \rangle \quad .6$$

يمكن البرهان على هذه الحقائق بسهولة اعتمادا على موضوعات الجداء الداخلي .

§ (2.3) أمثلة :

1 . لنعتبر مجموعة الاعداد المركبة $\mathbb{C}$. تؤلف $\mathbb{C}$ بالنسبة لعمليتي جمع الاعداد المركبة وضربها بعدد مركب

$$(1) \quad (z_1, z_2) \to z_1 + z_2 \qquad (2) \quad (\lambda, z) \to \lambda z$$

فراغا شعاعيا . اذا عزفنا على $\mathbb{C}$ عملية اضافية

$$(3) \quad (z_1, z_2) \longrightarrow \langle z_1 | z_2 \rangle = z_1^* z_2$$

رأينا ان هذه العملية تحقق مسلمات الجداء الداخلي كافة ، مما يجعل من $\mathbb{C}$ فراغ جداء داخلي بالنسبة للعمليات (1) و(2) و (3) .

2 . لنعتبر مجموعة فونيات الاعداد المركبة

$$\mathbb{C}^N = \{ Z : Z = (z_1, z_2, \dots, z_N) ; z_i \in \mathbb{C} \}$$

يؤلف $\mathbb{C}^N$ فراغا شعاعيا بالنسبة للعمليتين

جمع فونيتين $\quad Z + Z' = (z_1 + z_1', z_2 + z_2', \dots , z_N + z_N')$

ضرب فونية بعدد مركب λ $\quad \lambda Z = (\lambda z_1, \lambda z_2, \dots, \lambda z_N)$

وبسهولة نتحقق ان العملية

$$\langle Z | Z' \rangle = z_1^* z_1' + \dots + z_N^* z_N' = \sum_{i=1}^{N} z_i^* z_i'$$

تؤلف جداء داخليا على $\mathbb{C}^N$. وهكذا يصبح $\mathbb{C}$ فراغ جداء داخلي .

3 . لنعتبر مجموعة التوابع المركبة المستمرة المعرفة على المجال المغلق I وهي $\mathcal{C}_0(I)$. تؤلف هذه المجموعة فراغا شعاعيا بالنسبة الى عمليتي

• جمع التوابع $(\psi+\varphi)(x) = \psi(x)+\varphi(x)$

• ضرب تابع بعدد مركب $(\lambda\psi)(x) = \lambda\psi(x)$

ونتحقق الآن من ان التطبيق

$$< | > \quad \mathcal{C}_0(I)\times\mathcal{C}_0(I) \longrightarrow \mathbb{C}$$
$$(\psi,\varphi) \longrightarrow \int_I \psi^*(x)\varphi(x)\,dx$$

يؤلف جداء داخليا على $\mathcal{C}_0(I)$. بالحقيقة ومن خواص التكامل ومرافق عدد مركب نجد

$$(1) \quad <\psi|\varphi> = \int_I \psi^*\varphi\,dx = \left(\int_I \varphi^*\psi\,dx\right)^* = <\varphi|\psi>^*$$

$$(2) \quad <\psi|\varphi_1+\varphi_2> = \int_I \psi^*(\varphi_1+\varphi_2)\,dx = \int_I\psi^*\varphi_1dx+\int_I\psi^*\varphi_2dx$$
$$= <\psi|\varphi_1> + <\psi|\varphi_2>$$

$$(3) \quad <\psi|\lambda\varphi> = \int_I \psi^*(\lambda\varphi)\,dx = \lambda\int_I\psi^*\varphi\,dx = \lambda<\psi|\varphi>$$

$$(4) \quad <\psi|\psi> = \int_I \psi^*\psi\,dx = \int_I |\psi|^2 dx \geqslant 0$$

$$(5) \quad 0 = <\psi|\psi> = \int_I |\psi|^2 dx \Leftrightarrow |\psi| = \underline{0} \Leftrightarrow \psi = \underline{0} \,.$$

وهكذا نكون قد برهنا ان التطبيق السابق * - متناظر وخطي وموجب قطعا فهو اذن جداء داخلي على $\mathcal{C}_0(I)$.

نلاحظ بصدد الخاصة (5) أنه لا يمكن ان نستنتج ان $|\psi|=\underline{0}$ مالم يكن ψ مستمرا. بالحقيقة اذا لم يكن ψ مستمرا فان انعدام تكامل مربع قيمته المطلقة يؤدي الى أن التابع مساو للصفر في كل مكان تقريبا ، بعبارة ثانية يمكن ψ ان يختلف عن الصفر على مجموعة جزئية من I قياسها صفر ، ونسميها مجموعة مهملة .

٤ . يمكن البرهان بسهولة على أن التطبيق

$$(\psi, \varphi) \longrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} \psi^* \varphi \, dx$$

هو جداء داخلي على $\mathcal{C}_0(\mathbb{R})$. وبشكل عام واذا كان $W(x)$ تابعا موجبا قابلا للمكاملة على الفراغ كان

$$(\psi, \varphi) \longrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} W(x) \, \psi^* \varphi \, dx$$

جداء داخليا على $\mathcal{C}_0(\mathbb{R})$.

§ (2.4) فراغ التوابع الموجية : ماذا نقصد به ؟

اذا كانت جملتنا الكوانتية المدروسة مؤلفة من الكترون في الفراغ ، نجد أن موضع الالكترون يتعين باحداثياته (x, y, z) ويكون التابع الموجي الذى يصف حالة الالكترون تابعا في هذه الاحداثيات ، أي $\psi(x, y, z)$ ، واذا كانت جملتنا مؤلفة من ذرة الهيليوم التي نعتبر فيها ان النواة ساكنة ، تتعين الجملة بست احداثيات وهي مركبات شعاعي موضعي الالكترونين ، ويكون التابع الموجي للجملة تابعا في احداثيات الالكترونين معا $\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$.

في مثالنا الأول يكون فراغ التمثيل هو الفراغ الثلاثي (x, y, z) وفي الثاني الفراغ السداسي ($x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2$) .

ان التابع $\psi(x, y, z)$ يعين حالة لجملة مؤلفة من الكترون ولكي يكون المعنى الاحتمالي للتابع الموجي محققا يجب ان يتحقق الشرط التالي :

$$\iiint_{\mathbb{R}^3} |\psi(x, y, z)|^2 \, d\tau = 1$$

حيث $d\tau = dx\,dy\,dz$. يُرمَز لمجموعة التوابع $\psi(\underline{r})$ المعرفة على الفراغ والتي تأخذ قيما مركبة وتحقق الشرط السابق بالرمز $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ وتسمى التوابع التربيعية المكاملة على الفراغ او التوابع الموجية .

أما حالة الجملة المؤلفة من ذرة الهيليوم فتتعين بتابع مركب $\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$ معرف على $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ ويحقق الشرط

$$\iiint\iiint_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} |\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2)|^2 \, d\tau_1 \, d\tau_2 < \infty$$

حيث $d\tau_1 = dx_1 dy_1 dz_1$ و $d\tau_2 = dx_2 dy_2 dz_2$. اذن ففراغ التوابع الموجية في هذه الحالة هو مجموعة التوابع التربيعية المكاملة على $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$، ونرمز اليه بالرمز $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$.

لا يشترط اذن في التابع الموجي سوى ان يقبل المكاملة التربيعية على فراغ التمثيل.

تُعرَّف المؤثرات الكوانتية الممثلة للملحوظات الفيزيائية على الفراغ $\mathcal{L}^2$، ولكن ساحات تعريفها تختلف تبعا لطبيعة المؤثر. فيشترط في التوابع المنتمية الى ساحة تعريف الدفع $\hat{\underline{P}}$ ان يكون لها مشتقات جزئية من المرتبة الأولى. اما ساحة تعريف $\hat{H}$ فهي اضيق لأنه يشترط في التوابع المنتمية اليها ان تقبل الاشتقاق الجزئي مرتين. اما المؤثر الثابت α فتكون ساحة تعريفه منطبقة على $\mathcal{L}^2$.

أما العمليات التي تعرفها على $\mathcal{L}^2$ و نعتبر حالة البعد الواحد طلبا للسهولة) فهي

عملية جمع التوابع $\quad (\Psi + \Phi)(x) = \Psi(x) + \Phi(x)$

عملية الضرب بعدد مركب $\quad (\alpha\Psi)(x) = \alpha\Psi(x)$

وهاتان العمليتان تجعلان من $\mathcal{L}^2$ فراغا شعاعيا، وذلك بملاحظة ان مسلمات الفراغ الشعاعي محققة وان

$$\int |\Psi + \Phi|^2 dx \leq 2\int |\Psi|^2 dx + 2\int |\Phi|^2 dx < \infty$$

$$\int |\alpha\Psi|^2 dx = |\alpha| \int |\Psi|^2 dx < \infty$$

مما يعني ان $\Psi + \Phi$ و $\alpha\Psi$ هما من $\mathcal{L}^2$ حقا. وكذلك يحقق التطبيق

$$(\Psi, \Phi) \longrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Phi \, dx$$

مسلمات الجداء الداخلي كافة، مما يجعل من $\mathcal{L}^2$ فراغ جداء داخلي.

§3. الاستعماد والاستنظام (الاستنماد) :

سنتحدث عن مفهومي الاستعماد والاستنظام في فراغات الجداء الداخلي ، وهذا المفهومان ينطبقان ايضا على فراغ التوابع الموجية الذى هو حالة خاصة من فراغات الجداء الداخلي .

§(3.1) تعاريف :

ليكن $V, \langle\ |\ \rangle$ فراغ جداء داخلي وليكن $\psi, \varphi \in V, \langle\ |\ \rangle$. نقول عن ψ و φ انهما متعامدان اذا كان

$$\langle \psi | \varphi \rangle = 0$$

ونقول عن ψ إنه مستنظم (او مُنظّم) اذا كان

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

نعلم من موضوعات الجداء الداخلي ان الكمية $\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$ عدد حقيقي موجب وتسمى هذه الكمية نظيم الشعاع ψ ويرمز لها بالرمز $\|\psi\|$. اذن يقال عن ψ إنه مستنظم اذن كان $\|\psi\| = 1$.

نقول عن مجموعة جزئية $S = \{\psi_1, \psi_2, \ldots\}$ من فراغ جداء داخلي انها مستعمدة (او متعامدة) اذا كان

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0 \quad (n \neq m)$$

وانها مستنظمة (مُنظّمة) اذا كان

$$\|\psi_n\|^2 = \langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 \quad (\forall n)$$

ونقول عن S إنها مستنمدة اذا كانت مستعمدة ومستنظمة . أى اذا كان

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$$

وكلمة " مستنمدة "كلمة محدثة احداثا لوصف جملة مستعمدة ومستنظمة ، وقد توصف الجملة ايضا وصفا مكافئا بكلمة محدثة اخرى وهي " متنامدة" وذلك اختصارا لكلمتي متعامدة ومنظمة .

نقول عن مجموعتين جزئيتين S_1 و S_2 من فراغ جداء داخلي انهما متعامدتان اذا كان

$$\langle \psi | \varphi \rangle = 0 \quad \forall \psi \in S_1 , \forall \varphi \in S_2$$

عندما يكون فراغ الجداء الداخلي المعتبر فراغ التوابع الموجية يكون الجداء الداخلي معرفا بالشكل

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \varphi \, dx$$

وبذلك يصبح شرط استنماد مجموعة توابع موجية $\{\psi_1 , \psi_2 , \ldots \}$

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_m \, dx = \delta_{nm}$$

§ (3.2) حقائق :

1 . اذا كان $\psi , \varphi \in V , \langle | \rangle$ وكانا متعامدين فان

$$\langle \psi + \varphi | \psi + \varphi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle + \langle \varphi | \varphi \rangle$$

برهان :

$$\langle \psi + \varphi | \psi + \varphi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle + \langle \varphi | \varphi \rangle + \langle \varphi | \psi \rangle + \langle \psi | \varphi \rangle$$
$$= \langle \psi | \psi \rangle + \langle \varphi | \varphi \rangle$$

وهذه النتيجة ليست سوى نظرية فيثاغورس في فراغات الجداء الداخلي

$$\| \psi + \varphi \|^2 = \| \psi \|^2 + \| \varphi \|^2 .$$

2 . اذا كانت $B = \{\psi_1, \psi_2, \dots\}$ جملة كاملة مستنمدة في فراغ جداء داخلي ، فانه يمكن التعبير عن كل شعاع ψ من الفراغ بالشكل

$$\psi = \sum_i \langle \psi_i | \psi \rangle \psi_i$$

برهان : بما ان B جملة كاملة اذن يمكن نشر ψ على شكل تركيب خطي في عناصر B

$$\psi = \sum_i \lambda_i \psi_i$$

وبضرب الطرفين داخليا من اليسار بالشعاع ψ_k نجد

$$\langle \psi_k | \psi \rangle = \langle \psi_k | \sum_i \lambda_i \psi_i \rangle$$
$$= \sum_i \lambda_i \langle \psi_k | \psi_i \rangle = \sum_i \lambda_i \delta_{ki} = \lambda_k .$$

وبتعويض λ_k في (3.12) بالقيمة التي حسبت لها نحصل على النتيجة المطلوبة (3.11) .

3 . اذا كانت $\Psi = \{\psi_1, \psi_2, \dots\}$ مستنمدة كانت مستقلة خطيا .

برهان : لنعتبر تركيبا خطيا في عناصر Ψ ولنضع

$$\sum_i \lambda_i \psi_i = \underline{0}$$

بضرب طرفي هذه المعادلة داخليا من اليسار بالشعاع ψ_k نجد

$$\langle \psi_k | \sum_i \lambda_i \psi_i \rangle = \langle \psi_k | \underline{0} \rangle = 0$$

ومنه يكون

$$0 = \sum_i \lambda_i \langle \psi_k | \psi_i \rangle = \sum_i \lambda_i \delta_{ki} = \lambda_k$$

وبما ان ψ_k اختياري اذن فالعلاقة الاخيرة صحيحة مهما تكن k . وعليه فان $\lambda_k = 0$ مهما تكن k .

4 . اذا كان $\psi \in V, \langle \,|\, \rangle$ كان $\|\lambda \psi\| = |\lambda| \, \|\psi\|$ حيث ان $\lambda \in \mathbb{C}$. وينتج بصورة خاصة ان

$$\| \Psi \| = \| -\Psi \| = \| i\Psi \| = \| e^{i\theta}\Psi \| \qquad (\theta \in \mathbb{R})$$

برهان :

$$\| \lambda\Psi \|^2 = \langle \lambda\Psi | \lambda\Psi \rangle = \lambda^* \lambda \langle \Psi | \Psi \rangle = |\lambda|^2 \| \Psi \|$$

وبأخذ الجذر الموجب للطرفين نحصل على النتيجة المطلوبة .

§ (3.3) نظرية غرام - شميدت في الاستنماد :

اذا كانت $\Phi = \{\phi_1, \phi_2, \ldots \}$ مجموعة جزئية من فراغ جداء داخلي $V, \langle | \rangle$ وكانت مستقلة خطيا ، فانه يمكن انشاء بدءاً من Φ مجموعة مستنمدة $\Psi = \{\psi_1, \psi_2, \ldots \}$ حيث تكون مجموعة التراكيب الخطية في عناصر Φ مطابقة لمجموعة التراكيب الخطيـة في عناصر Ψ، أي

برهان : يتم البرهان بالانشاء . نأخذ ψ_1 بالشكل

$$\psi_1 = \phi_1 / \| \phi_1 \|$$

فيكون ψ_1 مستنظما ، لأن

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \left\langle \frac{\phi_1}{\| \phi_1 \|} \middle| \frac{\phi_1}{\| \phi_1 \|} \right\rangle = \frac{\langle \phi_1 | \phi_1 \rangle}{\| \phi_1 \|^2} = 1$$

نعرف بعدئذ f_2 بالعلاقة

$$f_2 = \phi_2 - \langle \psi_1 | \phi_2 \rangle \psi_1$$

فيكون f_2 و ψ_1 متعامدين لأن .

$$\langle \psi_1 | f_2 \rangle = \langle \psi_1 | \phi_2 \rangle - \langle \psi_1 | \phi_2 \rangle \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = 0$$

نأخذ ψ_2 معرفا بالعلاقة

$$\psi_2 = f_2 / \| f_2 \|$$

فيكون ψ_2 مستنظما ويعامد ψ_1 . نستمر في العملية ولنفرض اننا نحصل على الجملـة

ψ_1 و ψ_2 و ... و ψ_n حيث ان

$$<\psi_i|\psi_j> = \delta_{ij} \quad (i,j = 1,2,\ldots,n)$$

نعرف الآن f_{n+1} بالعلاقة

$$f_{n+1} = \phi_{n+1} - \sum_{i=1}^{n} <\psi_i|\phi_{n+1}> \psi_i$$

فيكون f_{n+1} معامدا للاشعة ψ_k حيث إن $(k=1,2,\ldots,n)$ ، لأنّ

$$<\psi_k|f_{n+1}> = <\psi_k|\phi_{n+1}> - \sum_{i=1}^{n} <\psi_i|\phi_{n+1}><\psi_k|\psi_i>$$

$$= <\psi_k|\phi_{n+1}> - \sum_{i=1}^{n} <\psi_i|\phi_{n+1}> \delta_{ki}$$

$$= <\psi_k|\phi_{n+1}> - <\psi_k|\phi_{n+1}> = 0$$

نأخذ

$$\psi_{n+1} = f_{n+1} / \| f_{n+1} \|$$

فيكون $\|\psi_{n+1}\| = 1$ ويكون معامدا للاشعة ψ_k حيث إن $(k = 1,2,\ldots,n)$.
ان انشاء غرام ـ شميدت بسيط وواضح بملاحظة اننا نحصل على ψ_2 بدءًا من ϕ_2 وذلك بحذف مركبة ϕ_2 المحمولة على ϕ_1 . وبشكل عام نحصل على ψ_n بدءًا من ϕ_n بحذف مركبات ϕ_n المحمولة على ϕ_1 و ϕ_2 و ... و ϕ_{n-1} ، ثم تنظيم الشعاع الناتج .
من الواضح الآن ان كل تركيب خطي في عناصر Ψ يمكن ان يكتب كتركيب خطي في عناصر Φ ، والعكس بالعكس . وبناء عليه يكون $Lin\ \Psi \equiv Lin\ \Phi$.

* بشكل عام : لتكن $\Phi = \{\phi_n | n \geq 1\}$ مجموعة اشعة كيفية في فراغ جداء داخلي $V, <\ |\ >$. لنرمز بـ $Lin\ \Phi$ الى الفراغ الشعاعي الجزئي المولد بالاشعة $\phi_n \equiv$ مجموعة التراكيب الخطية في عناصر $\Phi \equiv$ اصغر فراغ شعاعي جزئي يحتوى Φ . ننص الآن على

نظرية غرام ـ شميدت : توجد في $V, <\ |\ >$ مجموعة مستنمدة $\Psi = \{\psi_n | n \geq 1\}$ حيث يكون

$$Lin\, \Phi = Lin\, \Psi \tag{3.13}$$

برهان : اذا كان $\phi_1 = 0$ نهمله ، ونبدأ بأول شعاع ϕ_k غير معدوم ونسمه ϕ_{k_1}.
نبحث بعدئذ عن اول شعاع مستقل خطيا عن ϕ_{k_1} وليكن ϕ_{k_2} . نبحث بعدئذ عن اول شعاع ϕ_{k_3} مستقل خطيا عن ϕ_{k_1} و ϕ_{k_2}. ونستمر في العمل لنحصل على مجموعة مستقلة خطيا $\Phi' = \{\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \phi_{k_3}, \dots\}$ ، ومن الواضح ان

$$Lin\, \Phi' = Lin\, \Phi \tag{3.14}$$

نقوم الآن بحسب برهاننا السابق باستنماد Φ' لنحصل منها على مجموعة مستنمدة $\Psi = \{\psi_1, \psi_2, \dots\}$ ، ويكون

$$Lin\, \Phi' = Lin\, \Psi \tag{3.15}$$

وبدمج النتيجتين (3.14) و (3.15) نحصل على المطلوب (3.13) .

$\S^*$ (3.4) متراجحة شوارتز :

تنص هذه المتراجحة على أن الجداء الداخلي لكل عنصرين من فراغ جداء داخلي هو اصغر بالقيمة المطلقة من جداء نظيميها . أي أن

$$|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 \leq \langle\psi_1|\psi_1\rangle\langle\psi_2|\psi_2\rangle \tag{3.16}$$

أو

$$|\langle\psi_1|\psi_2\rangle| \leq \|\psi_1\|\,\|\psi_2\| \tag{3.17}$$

برهان : اذا كان $\psi_2 = 0$ كان الطرفان في (3.17) مساويين للصفر كانت المتراجحة محققة . اذا كان $\psi_2 \neq 0$ يكون $\|\psi_2\|$ موجبا ويكون برهان العلاقة (3.17) مكافئا البرهان على أن

$$\left|\left\langle\psi_1\middle|\frac{\psi_2}{\|\psi_2\|}\right\rangle\right| \leq \|\psi_1\|$$

لنضع $e = \Psi_2 / \|\Psi_2\|$ فيكون $\|e\| = 1$ ، ولنكتب Ψ_1 على الشكل

$$\Psi_1 = \langle e|\Psi_1\rangle e + \phi \qquad (3.19)$$

وبعبارة ثانية نكون قد حللنا Ψ_1 الى شعاعين احدهما $\langle e|\Psi\rangle e$ محمول على e ، والاخر ϕ متعامد مع e . ويمكن التحقق من صحة الافادة الاخيرة كما يلي :

$$\langle e|\Psi_1\rangle = \langle e|\Psi_1\rangle\langle e|e\rangle + \langle e|\phi\rangle$$
$$= \langle e|\Psi_1\rangle + \langle e|\phi\rangle$$

$$\Longrightarrow \quad \langle e|\phi\rangle = 0 \qquad (3.20)$$

ومن (3.19) وبالاستفادة من (3.20) نجد :

$$\|\Psi_1\|^2 = \|\langle e|\Psi_1\rangle e\|^2 + \|\phi\|^2$$
$$= |\langle e|\Psi_1\rangle|^2 + \|\phi\|^2$$

التي نجد منها ان

$$|\langle\Psi_1|e\rangle|^2 \leq \|\Psi_1\|^2 \qquad (3.21)$$

وتتحقق المساواة اذا وفقط اذا كان $\phi = \underline{o}$. أى اذا كان Ψ_1 و Ψ_2 مرتبطين خطيا ، كما تدل على ذلك (3.19).

ملاحظة : في الفراغ الاقليدى الثلاثي العادى يعرف الجداء الداخلي للاشعة (كما رأينا في مقرر الهندسة التحليلية) بالشكل

$$\underline{A} \cdot \underline{B} = |A|\,|B| \cos\theta$$

وتدل هذه العلاقة على أن اكبر قيمة للجداء الداخلي تحصل من أجل $\cos\theta = 1$ ، واصغر قيمة له تحصل من أجل $\cos\theta = -1$ ، ويكون الشعاعان $\underline{A}$ و $\underline{B}$ متوازيين في الحالة الأولى ومتعاكسين في الحالة الثانية . اما في الاوضاع الاخرى كافة فتكون قيم الجداء الداخلي محصورة بين نهايتيه العظمى $|A|\,|B|$ والصغرى $-|A|\,|B|$ وعليه فان :

$$|\underline{A} \cdot \underline{B}| \leq |A|\,|B|$$

وهذه العلاقة ليست سوى متراجحة شوارتز في اشعة الفراغ الاقليدى .

ع(3.5) ملاحظة :

. في الفراغ الشعاعي يمكن ان نجري عمليتين على الفراغ وهما جمع شعاعين وضرب شعاع بعدد مركب،ولا يزال هذا الفراغ محروما من اية بنية هندسية تقريبا،فلا سبيل فيه مثلا للحديث عن طول شعاع او عن الزاوية بين شعاعين ، واذا شئنا ان نعتبر ارتباط شعاعين خطيا تعريفا لتوازيهما ، لا يمكن الحكم على توازى شعاعين او عدم توازيهما ولا يمكن الحديث بالتالي عن مناحي مختلفة في الفراغ . يمكن أن نعرف في هذا الفراغ جملة محاور احداثية معينة بمبدأ O وقاعدة $\{e_1, \dots, e_N\}$، ويمكن بالتالي الحديث على مستقيمات في هذا الفراغ $\{\underline{OM} + \lambda e_1 : \lambda \in \mathbb{C}\}$. وكذلك تعرف عناصر الفراغ الشعاعي الجزئي $\{\lambda e_1 + \mu e_2 : \lambda, \mu \in \mathbb{C}\}$ مستويا يمر من المبدأ وكذلك يمكن تعريف مستويات فوقية مولدة بعدد $k \leq n$ من عناصر القاعدة .

بادخال الجداء الداخلي يصبح الحديث عن طول شعاع وتعامد شعاعين ممكنا كذلك يمكن تعريف زاوية شعاعين θ بالعلاقة .

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \| \Psi_1 \| \, \| \Psi_2 \| \cos \theta$$

كذلك يمكن تعريف قطعة مستقيمة $\overline{AB}$

$$\overline{AB} = \{ \underline{OA} + \lambda (\underline{OB} - \underline{OA}) : 0 \leq \lambda \leq 1 \}$$

ونرى ايضا ان الحديث عن قضايا مثل تعامد او توازى مستويين او عن الزاوية بينهما . . . وغير ذلك يمكن ان يعطى معنى بسهولة . واذا شئنا ايضا الحديث عن اشكال هندسية كتلك المدروسة في هندسة اقليدس كالمثلث او متوازى الاضلاع او الدائرة او القطوع لا يمكن فعل ذلك . يدعى فراغ الجداء الداخلي احيانا فراغا اقليديا وهذه التسمية مبررة لأن كل ما يمكن برهانه في هندسة اقليدس يمكن برهانه ايضا في هذا الفراغ . ان فراغ اقليدس ليس سوى فراغ جداء داخلي حقيقي .

باستطاعتك ان تتصور وجود اداتين هندسيتين هما مسطرة لقياس الاطوال ومنقلة لقياس الزاوايا وذلك نتيجة العمليات المعرفة على فراغ الجداء الداخلي .

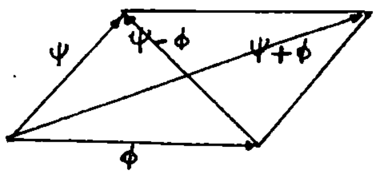
يمكن تحويل فراغ الجداء الداخلي الى فراغ متري وذلك بتعريف المسافة بين عنصرين Ψ و φ من فراغ الجداء الداخلي بالعلاقة .

$$d(\Psi,\varphi) = \|\Psi-\varphi\|$$

ونستطيع الآن بالاعتماد على المسافة المعرفة على الفراغ ان نضفي على الفراغ بنية بتولوجية فنعرف المجموعات المفتوحة والمغلقة ومفهوم الجوار منتقلين بعدئذ الى تعريف مفهوم النهاية ، واذا شئت ان تستزيد قليلا من هذه المواضيع فندعوك لمطالعة A § - D § ومن أجل التعمق فيها يمكنك العودة الى [2 و 3]

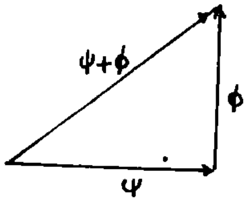
§* (3.6) تمارين :

1 . برهن على نظرية متوازى الاضلاع



$$\|\Psi+\phi\|^2+\|\Psi-\phi\|^2 = 2\|\Psi\|^2+2\|\phi\|^2$$

2 . لتكن $\{\Psi_1,\Psi_2,\ldots,\Psi_n\}$ مجموعة مستعمدة في فراغ جداء داخلي . برهن على نظرية فيثاغورس



$$\|\Psi_1+\Psi_2+\cdots+\Psi_n\|^2 = \|\Psi_1\|^2+\|\Psi_2\|^2+\cdots+\|\Psi_n\|^2.$$

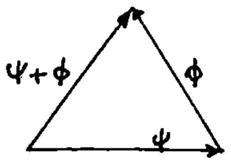
اذا كانت المجموعة السابقة مستنظمة ايضا فبرهن ان

$$\|\sum_{k=1}^{n}\lambda_k\Psi_k\|^2 = \sum_{k=1}^{n}|\lambda_k|^2 \quad , \quad \|\sum_{k=1}^{n}\Psi_k\| = \sqrt{n}$$

3 . برهن على نظرية الاستقطاب

$$4\langle\Psi|\phi\rangle = \{\|\Psi+\phi\|^2-\|\Psi-\phi\|^2\} - i\{\|\Psi+i\phi\|^2-\|\Psi-i\phi\|^2\}$$

٤ برهن على متراجحة المثلث



$$\big|\,\|\Psi\|-\|\phi\|\,\big| \leq \|\Psi+\phi\| \leq \|\Psi\|+\|\phi\|$$

(طول ضلع في مثلث اصغر من مجموع الضلعين الآخرين واكبر من القيمة المطلقة لفرقهما) .

برهان :

$$\|\Psi+\phi\|^2 = \|\Psi\|^2+\|\phi\|^2+\langle\Psi|\phi\rangle+\langle\phi|\Psi\rangle$$

$$= \|\Psi\|^2+\|\phi\|^2+2\,Re\,\langle\Psi|\phi\rangle$$

$$\leq \|\Psi\|^2+\|\phi\|^2+2\,|\langle\Psi|\phi\rangle| \quad \text{(خواص الاعداد العقدية)}$$

$$\leq \|\Psi\|^2+\|\phi\|^2+2\,\|\Psi\|\,\|\phi\| \quad \text{(متراجحة شوارتز)}$$

$$= \{\|\Psi\|+\|\phi\|\}^2$$

$$\Rightarrow \|\Psi+\phi\| \leq \|\Psi\|+\|\phi\|$$

ولبرهان الطرف الأول من المتراجحة نجد

$$\|\Psi+\phi\|^2 = \|\Psi\|^2+\|\phi\|^2+2\,Re\,\langle\Psi|\phi\rangle$$

$$\geq \|\Psi\|^2+\|\phi\|^2-2\,|\langle\Psi|\phi\rangle|$$

$$\geq \|\Psi\|^2+\|\phi\|^2-2\,\|\Psi\|\,\|\phi\|$$

$$= \{\|\Psi\|-\|\phi\|\}^2$$

$$\Rightarrow \|\Psi+\phi\| \geq \big|\,\|\Psi\|-\|\phi\|\,\big|$$

*§A الفراغات المنظمة ـ النظيم :

§ (A.1) تعريف :

ليكن V فراغا شعاعيا ، وليكن $\|\ \|$ تطبيقا من V الى مجموعة الاعداد الحقيقية الموجبة $\mathbb{R}_+$ ، تقابل وفقه كل شعاع $\Psi\in V$ بعدد حقيقي موجب أي أن :

$$\| \ \|: V \longrightarrow R_+$$
$$\Psi \longrightarrow \|\Psi\|$$

نقول عن التطبيق $\| \ \|$ انه نظيم على V اذا حقق الموضوعات التالية :

P_1: موجب قطعا $\|\Psi\| \geqslant 0$ و $(\|\Psi\| = 0 \Leftrightarrow \Psi = \underline{0})$

P_2: متجانس مطلقا $\|\lambda \Psi\| = |\lambda| \, \|\Psi\|$ (أو ا٠ا متجانس)

P_3: دون الجمعي $\|\Psi_1 + \Psi_2\| \leqslant \|\Psi_1\| + \|\Psi_2\|$

يسمى الفراغ الشعاعي V المعرف عليه نظيم $\| \ \|$ فراغا منظما ونرمز اليه بالرمز $V, \| \ \|$.

§ (A.2) امثلة عن الفراغات المنظمة :

1. كل فراغ جداء داخلي $V, \langle \ | \ \rangle$ يصبح فراغا منظمابتعريف نظيم عليه بالعلاقة.

$$\|\Psi\| = \sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle} \qquad (A.2)$$

والتطبيق الأخير يحقق موضوعات النظيم جميعها ، فقد برهنا في التمرين 4 من § (3.2) ذلك ، وهو موجب قطعا بالاستناد الى موضوعات الجداء الداخلي ويحقق خاصة دون الجمعية والتي ليست سوى احدى متراجحتي المثلث التي تم البرهان عليها في § (3.6) .

2. استنادا الى خاصة التجانس المطلق للنظيم نجد أن

$$\|\Psi\| = \|-\Psi\| = \|i\Psi\| = \|e^{i\theta}\Psi\| \quad (\theta \in R) \ ; \ \left\|\Psi / \|\Psi\|\right\| = 1$$

وكنا قد برهنا على هذه الحقائق من أجل النظيم المعرف بجداء داخلي .

3. في فراغ الاعداد المركبة C نرى أن

$$\|z\|^2 = \langle z | z \rangle = z^* z = x^2 + y^2 = |z|^2$$

نظيم على C . وهنا النظيم ينطبق تماما مع مفهوم طويلة عدد مركب كما يعرف في الساحة العقدية .

4 . في الفراغ $\mathbb{C}^N$ نبرهن بسهولة ان

$$\|Z\|_2^2 = \langle Z|Z\rangle = \sum_{i=1}^{N} z_i^* z_i = \sum_{i=1}^{N} |z_i|^2$$

نظيم على $\mathbb{C}^N$. وينتج البرهان مباشرة بعد ملاحظة ان

$$\langle Z|Z'\rangle = \sum_{i=1}^{N} z_i^* z_i$$

هو جداء داخلي على $\mathbb{C}^N$.

5 . يعرف الجداء الداخلي في $\mathbb{R}^3$ كما هو مألوف في الهندسة التحليلية

$$\langle X|Y\rangle = x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3 = \underline{X} \cdot \underline{Y} \qquad \text{(A.7)}$$

ويكون نظيم شعاع X معطى بالعلاقة

$$\|X\|^2 = x_1^2 + y_1^2 + z_1^2 = X^2 \qquad \text{(A.8)}$$

6 . برغم ان كل فراغ جداء داخلي يمكن جعله فراغا منظما بتعريف نظيم عليه بدءاً من الجداء الداخلي المعرف اصلا ، الا أن الفراغ المنظم ليس فراغ جداء داخلي بشكل عام ، ويمكن البرهان مثلا على أن

$$\|Z\|_p = \left\{ \sum_{i=1}^{N} |z_i|^p \right\}^{1/p} \qquad (p \geq 1) \qquad \text{(A.9)}$$

هو نظيم على $\mathbb{C}^N$. وهذا النظيم لا ينتج بشكل عام من الجداء الداخلي على $\mathbb{C}^N$. في حالة خاصة وعند ما تكون $p=2$ ، يؤول النظيم (A.9) الى (A.5) وعند ما تكون $p = 1$ ، نجد النظيم

$$\|Z\|_1 = \sum_{i=1}^{N} |z_i| = |z_1| + |z_2| + \cdots + |z_N|$$

ملاحظة : سوف نهتم في دراستنا بالفراغات المنظمة التي ينشأ النظيم عليها من جداء داخلي ، ولذلك وعند ما نتحدث عن فراغ منظم فانما نعني أنه فراغ جداء داخلي ايضا عرف عليه النظيم بالعلاقة (A.2) .

§ (A.3) الفراغ المنظم كفراغ متري :

اذا كان $V, \| \; \|$ فراغا منظما فان التطبيق : $d : V \times V \longrightarrow R_+$

$$(\psi, \varphi) \longrightarrow \|\psi - \varphi\| \qquad (A.11)$$

هو مسافة على $V, \| \; \|$. ولبرهان ذلك يكفي التحقق من أن هذا التطبيق يحقق مسلمات تابع المسافة :

P_1: موجب قطعا $d(\psi,\varphi) \geq 0$ و $d(\psi,\varphi)=0 \Leftrightarrow \psi=\varphi$

P_2: متناظر $d(\psi,\varphi) = d(\varphi,\psi)$

P_3: متراجحة المثلث $d(\psi,\chi) \leq d(\psi,\varphi) + d(\varphi,\chi)$

والبرهان على أن d المعرف ب (A.11) يحقق المسلمات السابقة امر مباشر . وينتج من هذا ان $V, \langle \, | \, \rangle$ هو فراغ مترى V, d حيث إن

$$d(\psi,\varphi) = \|\psi - \varphi\| = \sqrt{\langle \psi-\varphi | \psi-\varphi \rangle}$$

§ B. بعض الخواص المترية في فراغات الجداء الداخلي المنظمة :

I. تعاريف : ليكن V فراغ جداء داخلي معرفا عليه نظيم بالعلاقة (A.2)

1. نقول عن متتالية (ψ_n) من اشعة V انها متقاربة اذا كان

$$\exists \, \phi \in V \; : \; \|\psi_n - \phi\| \longrightarrow 0 \quad (n \longrightarrow \infty)$$

وبصورة رمزية تكتب

$$\phi = \lim_{n \to \infty} \psi_n$$

2. نقول عن متتالية (ψ_n) انها متتالية لكوشي اذا كان

$$\lim_{n,m \to \infty} \|\psi_n - \psi_m\| = 0$$

3. تسمي فراغ جداء داخلي V فراغ هلبرت اذا كانت كل متتالية لكوشي من عناصره متقاربة فيه .

II. حقائق : يمكن البرهان دون صعوبة على الحقائق التالية :

1. النظيم تابع مستمر : $\lim_{n \to \infty} \Psi_n = \Psi \Rightarrow \lim \|\Psi_n\| = \|\Psi\|$

ولبرهان ذلك ، نرى بحسب متراجحة المثلث أن $0 \leq \left| \|\Psi_n\| - \|\Psi\| \right| \leq \|\Psi_n - \Psi\|$

وبالانتقال الى النهايات وملاحظة ان القيمة المطلقة تابع مستمر نجد :

$$0 \leq \left| \lim \|\Psi_n\| - \|\Psi\| \right| \leq \lim_{n \to \infty} \|\Psi_n - \Psi\| = 0 \blacksquare$$

2. اذا كانت (Ψ_n) متقاربة كانت نهايتها وحيدة (البرهان : كما في حالة $\mathbb{R}$)

. اذا كانت (Ψ_n) متتالية لكوشي كانت $(\|\Psi_n\|)$ متقاربة في $\mathbb{R}$.

. اذا كانت (Ψ_n) متقاربة كانت متتالية لكوشي ، والعكس غير صحيح بالضرورة

III. الفراغات المترية القابلة للفصل :

1. تعريف : تسمى المجموعة $B_r(\Psi_0) = \{\Psi \in V : \|\Psi - \Psi_0\| \leq r\}$ كرة مفتوحة ونسمي r نصف قطرها و Ψ_0 مركزها .

2. لتكن S مجموعة جزئية من V . نقول عن شعاع $\Psi \in V$ انه نهاية ل S او نقطة تجمع لها اذا كانت كل كرة مفتوحة مركزها Ψ تحتوى عنصرا على الأقل من S .

3. لصاقة مجموعة : نسمي مجموعة نهايات S لصاقة S ونرمز لها ب $\bar{S}$.

4. المجموعة الكثيفة في فراغ : نقول عن مجموعة جزئية S من V انها كثيفة فيه اذا كان $\bar{S} = V$. وبشكل مكافىء

$$\bar{S} = V \Leftrightarrow \forall \Psi \in V , \exists \Phi \in S : \|\Psi - \Phi\| < \delta \quad \forall \delta \in \mathbb{R}_+$$

5. الفصل : نقول عن فراغ جداء داخلي انه قابل للفصل اذا وجدت فيه مجموعة جزئية قابلة للعد وكثيفة فيه .

$\S 6^*$. فراغات هلبرت :

1. فراغ الجداء الداخلي التام : نقول عن فراغ داخلي انه تام اذا كانت كل متتالية لكوشي من عناصره متقاربة فيه . يمكن البرهان مثلا ان $\mathbb{C}^N$ فراغ داخلي تام، وبصورة خاصة يكون $\mathbb{C}$ و $\mathbb{R}$ كذلك .

2 . قابلية فصل فراغ جداء داخلي : يكون فراغ مترى قابلا للفصل اذا وجدت مجموعة جزئية منه $\mathcal{S}$ قابلة للتعداد وكثيفة فيه . وفي حالة الفراغات المنظمة، وفراغ الجداء الداخلي احدها، يتم التحقق من قابلية الفصل بسهولة .

نظرية : لتكن $\Psi=\{\psi_1,\psi_2,\dots\}$ مجموعة جزئية من $V,\langle\ |\ \rangle$ ولنفرض انها مستتمدة وتقبل العد . يكون V قابلا للفصل اذا كانت المجموعة $Lin\Psi$ كثيفة فيه .

يتلخص البرهان في اظهار أن المجموعة :

$$Q\,Lin\Psi=\{\sum_k q_k\psi_k \mid q_k\in Q_{\mathbb{C}},\ \psi_k\in V,\langle\ |\ \rangle\}$$

حيث أن $q_k=p_k+ir_k$ و $p_k,r_k\in Q$، كثيفة في الفراغ . ومن الواضح ان هذه المجموعة تقبل العد لأنها الجداء الديكارتي لثلاث مجموعات تقبل العد

$$Q\,Lin\Psi = Q\times Q\times\Psi$$

نصيغ اذن قابلية فراغ جداء داخلي للفصل بقولنا : يكون V قابلا للفصل اذا وجدت فيه مجموعة جزئية مستتمدة $\{\psi_n\}$ حيث يمكن الاقتراب من كل عنصر $\phi\in V$ بدلالة تركيب خطي في عناصر $\{\psi_n\}$:

$$\forall\phi\in V,\forall\delta>0,\exists\lambda_1,\lambda_2,\dots\in\mathbb{C}:\|\phi-\sum\lambda_i\psi_i\|<\delta$$

يقال عن مجموعة جزئية مستتمدة قابلة للعد انها مجموعة كاملة في $V,\langle\ |\ \rangle$ اذا كان $\overline{Lin\Psi}=V$.

اذا كان $V,\langle\ |\ \rangle$ فراغ جداء داخلي منتهي البعد كان حتما قابلا للفصل، لأنه يمكن التعبير عن كل شعاع منه على شكل تركيب خطي في عناصر قاعدة منتهية العدد .

3. فراغ هلبرت :

هو بالتعريف فراغ جداء داخلي تام ، ونرمز اليه بـ $\mathcal{H}$.

من الواضح ان فراغات هلبرت المنتهية البعد تقبل الفصل . اما فراغات هلبرت غير منتهية البعد فهي ليست كذلك بالضرورة . نتعامل في ميكانيك الكم غالبا وفراغات هلبرت غير منتهية البعد ، وقابلية فصل هذه الفراغات امر ضروري نظرا الى حاجتنا الى نشر التابع الموجي . لهذا السبب يُدخِل بعض المؤلفين مسلمة الفصل في صلب تعريف فراغ هلبرت ، وهو ما سوف نلتزم به .

D§. فراغ التوابع التربيعية المكاملة (فراغ التوابع الموجية)

اذا كان $\psi(x)$ تابعا مركبا معرفا على مجال $D \subseteq \mathbb{R}$ فان ψ تربيعي المكاملة تعريفا اذا كان التكامل

$$I(\psi) = \int_D |\psi|^2 dx$$

موجود ومنته .

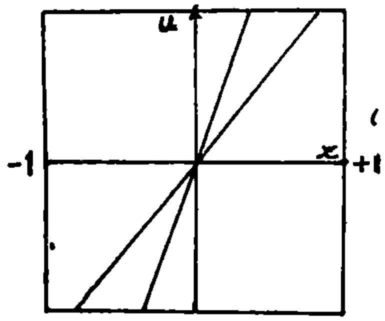
لنعتبر المجموعة $L_2(D)$ المؤلفة من التوابع المركبة المستمرة والتربيعية المكاملة على D . يمكن البرهان دون صعوبة ان هذه المجموعة تؤلف فراغا شعاعيا بالنسبة لعمليتي جمع تابعين وحاصل ضرب تابع بعدد مركب . فاذا كان ψ و ϕ تربيعي المكاملة على D كان كذلك $\lambda\psi$ و $\psi+\phi$ ، ويتم البرهان استنادا الى خواص القيمة المطلقة والتكامل . وكذلك يمكن البرهان ان

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_D \psi^* \phi \, dx$$

هو جداء داخلي على $L_2(D)$ ، وذلك بملاحظة ان مسلمات الجداء الداخلي محققة وان

$$|\langle \psi | \phi \rangle| \leqslant \int_D |\psi||\phi| \, dx \leqslant \frac{1}{2}\int_D |\psi|^2 dx + \frac{1}{2}\int_D |\phi|^2 dx < \infty$$

ان فراغ الجداء الداخلي $L_2(D)$ غير تام ولذلك فهو ليس فراغ هلبرت. ولكي نبرهن ذلك نجد متوالية لكوشي من عناصر $L_2(D)$ غير متقاربة فيه .



ليكن $D=[-1,+1]$ ولنعتبر مجموعة التوابع الحقيقية المستمرة $u(x)$ المعرفة على هذا المجال، وهي من $L_2(D)$ وضوحا . يمكن البرهان بسهولة على أن المتوالية $(u_n(x))$ المعرفة بالشكل

$$u_n(x) = \begin{cases} -1 & -1 \le x \le -1/n \\ nx & -1/n \le x \le 1/n \\ 1 & 1/n \le x \le 1 \end{cases}$$

في متوالية لكوشي . ولكن نهاية هذه المتوالية هي التابع الدرجي (تابع الخطوة) :

$$\theta(x) = \begin{cases} -1 & -1 \le x < 0 \\ 0 & x = 0 \\ +1 & 0 < x \le 1 \end{cases}$$

وهو لا ينتمي الى $L_2(D)$ لأنه غير مستمر ، اذن $L_2(D)$ غير تام .

لكي ننشئ فراغا تاما ، نضيف الى $L_2(D)$ جميع التوابع التي نهايات لمتواليات لكوشي في عناصر $L_2(D)$ وبهذا نكون قد اغفينا عناصر المجموعة الجديدة $\tilde{L}_2(D)$ التي نحصل عليها من تحقيق شرط الاستمرار الذى كنا نفرضه على عناصر $L_2(D)$. وبهذا تحتوى المجموعة الجديدة $\tilde{L}_2(D)$ على توابع مستمرة واخرى غير مستمرة . وقبل ان ندعي ان $\tilde{L}_2(D)$ فراغ جداء داخلي تام من التوابع التربيعية المكاملة على D ، يجب أن نتأكد بأن التوابع المبالغة في انقطاعاتها تقبل المكاملة التربيعية . ولكن النتيجة خلاف ما نبغي ، ان حافظنا على التعريف الريماني التكامل . ولهذا السبب نجد نا مضطرين لتوسيع مفهوم التكامل الريماني ، وذلك حتى يتسنى لنا مكاملة التوابع المبالغة في انقطاعاتها ، فاذا حققنا ذلك امكن جعل $\tilde{L}_2(D)$ فراغ جداء داخلي تاما . قام لوبيغ بتوسيع مفهوم التكامل، والتكامل الجديد يحمل اسمه . وهو قادر على مكاملة طيف واسع جدا من التوابع المنقطعة وكمثال على ذلك التابع التالي :

$$\psi(x) = 1 \qquad x \in Q$$
$$\psi(x) = 0 \qquad x \notin Q$$

ان تكامل ريمان للتابع $\varphi(x)$ غير موجود لأن النهايتين العليا والدنيا غير متساويتين

$$\bar{\int} \varphi(x)\, dx = 1 \quad , \quad \underline{\int} \varphi(x)\, dx = 0$$

اما تكامل زيمان لهذا التابع فهو موجود ويساوى الصفر .

فراغ هلبرت $\mathcal{L}^2(D)$:

نرمز ب $\mathcal{L}^2(D)$ لمجموعة التوابع المركبة المعرفة على منطقة D من الفراغ والتي تقبل المكاملة التربيعية بالنسبة لتكامل لوبيغ . تؤلف هذه المجموعة فراغ هلبرت بالنسبة لعمليات جمع التوابع وضربها بعدد وللجداء الداخلي :

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_D \psi^* \phi \, d\tau$$

حيث التكامل هنا هو تكامل لوبيغ و $d\tau$ عنصر الحجم من الفراغ .

نلفت النظر الى أن ميكانيك الكم يتعامل غالبا ومؤثرات معرفة على فراغ التوابع التربيعية المكاملة على المحور الحقيقي $\mathbb{R}$ او على $\mathbb{R}^3$ او على أجزاء منها . وفي كل حال نريد ان يكون هذا الفراغ قابلا للفصل . يبرهن على قابلية الفصل غالبا بسهولة اذ يمكن البرهان على أن مجموعة كثيرات حدود ليجندر .

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell . \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2-1) \qquad \ell = 0, 1, 2, \cdots$$

جملة كاملة في الفراغ $\mathcal{L}^2[-1,1]$ (نلفت الانتباه الى أن المجموعة او الجملة الكاملة في حالة فراغات هلبرت غير المنتهية البعد تعرف كالتالي : هي مجموعة جزئية S من $\mathcal{H}$ تقبل العد وحيث إن $\overline{\text{Lin} S} = \mathcal{H}$) . وكذلك يبرهن على ان توابع ليجندر المرفقة $P_\ell^m(x)$ ، من أجل كل قيمة ل m ، جملة كاملة مستندة في الفراغ السابق. ويبرهن ايضا ان مجموعة التوابع .

$$\psi_n(x) = (\sqrt{\pi}\, 2^n . n!)^{-1/2} \, e^{-x^2/2} \, H_n(x) \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

حيث ان $H_n(x)$ كثيرات حدود هرميت ، جملة كاملة مستنمدة في $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. وسوف يمر معنا خلال دراستنا امثلة متعددة من هذه الجمل الكاملة .

ملاحظة : بعد ان الغينا شرط استمرارية عناصر $\mathcal{L}^2(D)$ نجد أن

$$\|\psi\|^2 = \int_D |\psi|^2 dx = 0 \not\Rightarrow \psi = \underline{0}$$

وهذه النتيجة لا تناقض تعريف الجداء الداخلي ، وذلك لأن كل عنصر ψ من $\mathcal{L}^2(D)$ هو ممثل لصف تكافوء $\tilde{\psi}$ حيث أن

$$\psi, \phi \in \tilde{\psi} \Leftrightarrow \psi \sim \phi \Leftrightarrow \|\psi - \phi\| = 0 \Leftrightarrow \int_D |\psi - \phi|^2 dx = 0$$

ولهذا فان $\|\psi\| = 0$ يقتضي ان ψ معدوم في كل مكان تقريبا في D. ومن حيث نتيجة المكاملة لا فرق بين ψ وبين $\underline{0}$ المعدوم في كل مكان في D . بعبارة ثانية نعتبر جميع التوابع التي تختلف عن بعضها على مجموعة ذات قياس معدوم متكافئة . من أجل الاستزادة ننصح القارىء بالعودة الى [2 و 3] .

$\S$ E. تمثيل فراغات هلبرت القابلة للفصل :

1 . لنرمز بـ $\ell^2(\infty)$ لمجموعة الاعمدة ذات العناصر المركبة .

$$\alpha = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

التي تحقق الشرط $\sum_{k=1}^{\infty} |a_k|^2 < \infty$. ولنعرف على هذه المجموعة العمليتين الشعاعيتين

$$\alpha + \beta = \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \end{bmatrix} , \qquad \lambda\alpha = \begin{bmatrix} \lambda a_1 \\ \lambda a_2 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (\lambda \in \mathbb{C}) ,$$

وعملية جداء داخلي

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} a_k^* b_k$$

تؤلف $\ell^2(\infty)$ بالنسبة للعمليات السابقة فراغ هلبرت قابل للفصل .

2 . نظرية : ان كلا من الافادات التالية هي شرط لازم كاف لكي تكون الجملة المستندة $B=\{\psi_1,\psi_2,\ldots\}$ جملة كاملة في فراغ هلبرت قابل للفصل $\mathcal{H}$:

$$(i)\quad \langle \psi_k | f\rangle = 0 \quad \forall \psi_k \Rightarrow f = 0 \qquad (i)$$

$$(ii)\quad \forall f \in \mathcal{H} : \lim_{n\to\infty} \| f - \sum_{k=1}^{n} \langle \psi_k | f \rangle \psi_k \| = 0 \qquad (ii)$$

وتُكتب هذه العلاقة بالشكل الرمزى

$$f = \sum_{k=1}^{\infty} \langle \psi_k | f \rangle \psi_k$$

$$(iii)\quad \forall f, g \in \mathcal{H} : \langle f | g \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \langle f | \psi_k \rangle \langle \psi_k | g \rangle$$

$$(iv)\quad \forall f \in \mathcal{H} : \| f \|^2 = \sum_{k=1}^{\infty} |\langle \psi_k | f \rangle|^2$$

3 . ان كل فراغات هلبرت اللامنتهية البعد والقابلة للفصل هي ايزومورفية للفراغ $\ell^2(\infty)$.

برهان : بحسب الفرض يوجد في $\mathcal{H}$ جملة كاملة مستندة $\{\psi_1,\psi_2,\ldots\}$ ، وبحسب النظرية السابقة نجد

$$\forall f \in \mathcal{H} : f = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \psi_k \qquad c_k = \langle \psi_k | f \rangle$$

حيث ان

$$\sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 = \| f \|^2 < +\infty$$

وبناء عليه يكون

$$\alpha_f = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} \in \ell^2(\infty)$$

وبالعكس واذا كان

$$\beta = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{bmatrix} \in \ell^2(\infty)$$

فان $(f_n)=(\sum_{k=1}^{n} b_k e_k)$ تكون متتالية لكوشي من عناصر $\mathcal{H}$. وبما ان $\mathcal{H}$ تـــام تكون هذه المتتالية متقاربة من عنصر

$$f=\sum_{k=1}^{\infty} b_k e_k=\sum_{k=1}^{\infty} \langle e_k | f \rangle e_k \in \mathcal{H}$$

بناء على هذا نجد تقابلا (1-1 وعلى) بين $\mathcal{H}$ و $\ell^2(\infty)$:

$$f \longleftrightarrow \alpha_f$$

ومن السهل البرهان ان هذا التقابل يحقق خواص الايزوسورفيسم

$$f_1+f_2 \longleftrightarrow \alpha_{f_1}+\alpha_{f_2}$$

$$\lambda f \longleftrightarrow \lambda \alpha_f \quad (\lambda \in \mathbb{C})$$

$$\langle f_1 | f_2 \rangle \longleftrightarrow \langle \alpha_{f_1} | \alpha_{f_2} \rangle$$

نسمي الايزومورفيسم السابق تمثيلا لـ $\mathcal{H}$ بالفراغ $\ell^2(\infty)$. تمثل التوابع الموجية وهـــي عناصر من ℓ^2 بعناصر من $\ell^2(\infty)$.

لقد عرضنا كافة مواضيع الملاحق الاخيرة §A - §E بايجاز بالغ ، ولا بـــد للقارىء الراغب في الاستزادة من العودة الى [2 أو 3] .

****

الفصل الثالث

المؤثرات في فراغ التوابع الموجية

تُمثّل مختلف الملحوظات الفيزيائية في ميكانيك الكم بموئثرات في فراغ التوابع الموجية . وتتصف هذه الموئثرات بصفة خاصة هي صفة الهرميتية . سوف ندرس في هذا الفصل مفهوم الموئثرات الخطية بشكل عام وبعض خواصها وتمثيلها بمصفوفات، كما سندرس الموئثرات الهرميتية والمعادلة الخاصة التي تلعب دورا اساسيا في ميكانيك الكم .

1§ . الموئثرات الخطية

§ (١.١) مفهوم موئثر :

ان موئثرا $\hat{A}$ في فراغ التوابع الموجية $\mathcal{L}^2$ هو تطبيق لهذه المجموعة في نفسها . وبعبارة اخرى هو عملية نقابل وفقها كل تابع $\psi(x,y,z)$ من فراغ التوابع التربيعية المكاملة بتابع آخر $\hat{A}\psi(x,y,z)$.

لتوضيح مفهوم موئثر نسوق الامثلة التالية التي نعتبر فيها غالبا حالة البعد الواحد والتعميم الى الفراغ الثلاثي البعد امر بسيط .

١ ـ لنعتبر عملية ضرب كل تابع $\psi(x)$ بعدد ثابت α . يمكن أن نمثل هذه العملية بموئثر $\hat{A} = \alpha$ حيث يكون $\hat{A}\psi(x) = \alpha\psi(x)$.

2 ـ لنعتبر عملية ضرب كل تابع $\psi(x)$ بالاحداثي x . يمكن ان نعبّر عن هذه العملية بالموئثر $\hat{A} = x$ ، وتعني $\hat{A}\psi(x) = x\psi(x)$. وبالمثل يعني الموئثر $\hat{A} = f(x)$

أن $\hat{A}\psi(x) = f(x)\psi(x)$.

3 - تؤلف عملية الاشتقاق الجزئي مؤثرا $\hat{A} = \partial/\partial x$ تقابل وفقه كل تابع $\psi(x,y,z)$ بمشتقه الجزئي بالنسبة الى x . أى $\hat{A}\psi(x,y,z) = \partial\psi(x,y,z)/\partial x$.
وقد يكون الاشتقاق من مرتبة اعلى فيعني مثلا $\hat{A} = \partial^2/\partial x^2$ أن $\hat{A}\psi = \partial^2\psi/\partial x^2$.

§ (1.2) تعريف المؤثرات الخطية

نقول عن مؤثر $\hat{A}$ إنه خطي اذا كان

$$\hat{A}(\lambda\psi) = \lambda\hat{A}\psi \tag{1.1}$$

$$\hat{A}(\psi_1+\psi_2) = \hat{A}\psi_1 + \hat{A}\psi_2 \tag{1.2}$$

وذلك من اجل اى تابع موجي ψ وأى عدد مركب λ . يمكن ان نجعل الشرطين السابقين بالشرط الوحيد

$$\hat{A}(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1\hat{A}\psi_1 + \lambda_2\hat{A}\psi_2 \tag{1.3}$$

وذلك $(\forall\lambda_1,\lambda_2 \in \mathbb{C}, \forall\psi_1,\psi_2 \in \mathcal{L}^2)$.

نقول عن مؤثر انه $*$ - خطي او خطي مائل اذا كان

$$\hat{A}(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1^*\hat{A}\psi_1 + \lambda_2^*\hat{A}\psi_2 \tag{1.4}$$

ان جميع المؤثرات التي قدمنا امثلة عنها هي مؤثرات خطية ، وسوف نتعامل في ميكانيك الكم ومؤثرات خطية فقط . هذا وان جميع دراستنا اللاحقة ستنصب على المؤثرات الخطية .

§ 2 . جبر المؤثرات

نبدأ بتعريف مؤثرين خاصين وهما :

المؤثر الصفر : ونرمز له ب $\hat{O}$ ويعرف كما يلي

$$\hat{O}\psi = \underline{0} \qquad (\forall\psi \in \mathcal{L}^2) \tag{2.1}$$

المؤثر المطابق : ونرمز له ب $\hat{I}$ (وأحيانا بالرمز 1) ويعرف كما يلي

$$\hat{I}\Psi = \Psi \qquad (\forall \Psi \in \mathcal{L}^2) \tag{2.2}$$

نقول عن موئثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ إنهما متساويان اذا كانا يمثلان العملية نفسها ، وبمعنى آخر اذا كان اثراهما في كل تابع Ψ متساويين . أى

$$\hat{A} = \hat{B} \Leftrightarrow \hat{A}\Psi = \hat{B}\Psi \qquad \forall \Psi$$

§ (2.1) العمليات في الموئثرات

لنعتبر مجموعة الموئثرات الخطية على فراغ التوابع الموجية ولنرمز لهذه المجموعة بالرمز $\mathcal{U}$. نعرف على $\mathcal{U}$ العمليات التالية :

1 ـ ضرب موئثر بعدد مركب : نعرف جداء الموئثر $\hat{A}$ بالعدد المركب α ونرمز اليه بالرمز $\alpha\hat{A}$ بأنه موئثر فعله في كل تابع Ψ مساو لجداء فعل $\hat{A}$ في Ψ بالعدد α ،

$$(\alpha\hat{A})\Psi = \alpha(\hat{A}\Psi) \tag{2.4}$$

2 ـ جمع موئثرين : نعرف مجموع موئثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ ونرمز اليه بالرمز $\hat{A}+\hat{B}$ بأنه موئثر فعله في كل تابع Ψ مساو لمجموع فعلي $\hat{A}$ و $\hat{B}$ في Ψ :

$$(\hat{A}+\hat{B})\Psi = \hat{A}\Psi + \hat{B}\Psi \tag{2.5}$$

3 ـ جداء موئثرين : عند ما يوئثر $\hat{A}$ في تابع Ψ ينتج عنه تابعا $\hat{A}\Psi$. يمكن ان نوئثر في هذا التابع الحاصل بموئثر $\hat{B}$ لينتج عنه التابع $\hat{B}(\hat{A}\Psi)$. يمكن اعتبار التابع الاخير ناتجا عن Ψ بسبب موئثر وحيد نرمز اليه بالرمز $\hat{B}\hat{A}$ ، ونفهمه كما يلى : يوئثر A في Ψ اولا ثم يوئثر B في الناتج

$$\hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{B}(\hat{A}\Psi) \tag{2.6}$$

بشكل عام يكون $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ ، واذا تحققت المساواة قلنا ان $\hat{A}$ و $\hat{B}$ يقبلان التبديل اوتبديليان او متآلفان .

من الواضح انه اذا كان $\hat{A}$ و $\hat{B}$ خطيين فكذلك يكون $\alpha\hat{A}$ و $\hat{A}+\hat{B}$ و $\hat{A}\hat{B}$.

فمثلا

$$(AB)(\alpha\Psi) = A(B(\alpha\Psi)) = A(\alpha B\Psi) = \alpha(AB)\Psi$$

$$(AB)(\Psi+\Phi) = A(B(\Psi+\Phi)) = A(B\Psi + B\Phi) = (AB)\Psi + (AB)\Phi$$

بالحقيقة ان مجموعة المؤثرات الخطية المعرفة على فراغ التوابع الموجية تؤلف جبرا تجميعيا ، وللاستزادة من هذا الموضوع نعيد القارئ الى [3] .

§ (2.2) امثلة وتمارين

1 ـ استنادا الى العمليات السابقة في المؤثرات نفهم ان مايعنيه المؤثر $\hat{A} = x + 2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ مثلا ، هو

$$\hat{A}\Psi = x\Psi + 2\,\partial^2\Psi/\partial x^2$$

وأن مايعنيه المؤثر $\hat{A} = (\frac{\partial}{\partial x}x)^2$ هو

$$\hat{A}\Psi = (\frac{\partial}{\partial x}x)(\frac{\partial}{\partial x}x)\Psi$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}(x(\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)))$$

2 ـ لنعتبر المؤثر $(\frac{\partial}{\partial x}x)$ والذى يمثل جداء المؤثر $\partial/\partial x$ بالمؤثر $\hat{x}$ بالترتيب المبيّن . من السهل ان نبرهن ان

$$\frac{\partial}{\partial x}x = 1 + x\,\partial/\partial x$$

ويتم البرهان بالتحقق من أن أثرى هذين المؤثرين على كل تابع متساويان

$$(\frac{\partial}{\partial x}x)\Psi = \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) \qquad \text{(تعريف جداء مؤثرين)}$$

$$= \frac{\partial x}{\partial x}\Psi + x\frac{\partial\Psi}{\partial x} \qquad \text{(مشتق جداء)}$$

$$= 1.\Psi + x\frac{\partial}{\partial x}\Psi \qquad \text{(مفهوم مؤثر)}$$

$$= (1 + x\frac{\partial}{\partial x})\Psi \qquad \text{(تعريف مجموع مؤثرين)}$$

3 ـ لنعتبر المؤثرين $\hat{A} = x$ و $\hat{B} = \partial/\partial x$. من أجل كل تابع Ψ يكون لدينا

$$\left(x\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}x\right)\psi = x\frac{\partial}{\partial x}\psi-\frac{\partial}{\partial x}x\psi$$
$$= x\frac{\partial\psi}{\partial x}-\left(1+x\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi$$
$$= -\psi$$

وبناء عليه نجد ان هذين المؤثرين غير تبديليين لان $I- = x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x$. نرمز عادة الى المؤثر I بالرمز 1 ، ولذلك نستبدل بالطرف الثاني في العلاقة السابقة $1-$. نلفت الانتباه الى أن مانعنيه بالمؤثر $\hat{\alpha}$ ، حيث ان $\hat{\alpha}\psi=\alpha\psi$ و $\alpha\in\mathbb{C}$ ، هو المعنى الضمني $\hat{\alpha}=\alpha\hat{I}$.

4 ـ لنعتبر التوابع الموجية $\psi(r,\theta,\phi)$ معبراً عنها في الاحداثيات القطبية . برهن على ان

$$\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right)^2=\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}$$

برهان : نجد بالنسبة للمساواة الاولى ان

$$\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right)\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right)\psi=\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r\left(\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(r\psi)\right)\right)\right)\right)$$
$$=\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(r\psi)\right)\right)$$
$$=\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\psi$$

أما بالنسبة للثانية فنجد أن

$$\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\right)\psi=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(r\psi)\right)=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\psi+r\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)$$
$$=\frac{1}{r}\left(\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{\partial\psi}{\partial r}+r\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}\right)$$
$$=\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}$$

وسوف يبرز معنا هذا المثال لدى دراسة الحقل المركزي .

5 ـ احسب $\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\right)^2=?$

6 - برهن على ان

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}+x\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}-x\right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2 - 1$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}-x\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}+x\right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2 + 1$$

هل يقبل عاملي الجداء في الطرف الاول في أى من العلاقتين السابقتين التبديل .

§ 3 . المبادل

§ (3.1) تعريف

نعرف مبادل موءثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ وللتأكيد على اهمية الترتيب نقول $\hat{A}$ مبادل $\hat{B}$ ، ونرمز اليه بالرمز $[\hat{A},\hat{B}]$ بالعبارة

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

وهكذا نرى أن موءثرين يكونان تبديليان (ونقول ايضا انهما متآلفان) اذا كان مبادلهما هو الموءثر الصفر. اما اذا كان مبادلهما غير معدوم فيوصفان بانهما لا يقبلان التبديل أو غير متآلفين .

ان مبادل موءثرين خطيين هو موءثر خطي وبالفعل

$$\begin{aligned}[A,B](\Psi+\Phi) &= AB(\Psi+\Phi) - BA(\Psi+\Phi)\\ &= AB\Psi - BA\Psi + AB\Phi - BA\Phi \qquad (\text{خطيان } BA \text{ و } AB)\\ &= [A,B]\Psi + [A,B]\Phi\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}[A,B](\lambda\Psi) &= AB(\lambda\Psi) - BA(\lambda\Psi)\\ &= \lambda AB\Psi - \lambda BA\Psi = \lambda[A,B]\Psi\end{aligned}$$

§ (3.2) خواص عملية المبادل

استنادا الى تعريف المبادل يمكن التحقق دون صعوبة من صحة الخواص التالية:

1. $[A,B] = -[B,A]$

2. $[A, B+C] = [A,B] + [A,C]$

3. $[A, BC] = B[A,C] + [A,B]C$

4. $[A,[B,C]] + [B,[C,A]] + [C,[A,B]] = 0$

تُعرَف الخاصة الاخيرة باسم مطابقة جاكوبي .

تبرهن مثلا الخاصة 3 كما يلي

$$[A, BC] = ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA$$
$$= [AB - BA]C + B[AC - CA]$$
$$= B[A,C] + [A,B]C$$

§ (3.3) امثلة وتوضيحات

1 - يتآلف كل موئثر مع نفسه ، وبالفعل وبحسب التعريف ، نجد ان $[\hat{A},\hat{A}] = \hat{0}$

2 - يتآلف كل موئثر مع الموئثر المطابق I ومع كل موئثر من الشكل $\hat{\alpha} \equiv \alpha \hat{I}$.

$$[\hat{A}, \hat{I}] = 0 \quad , \quad [\hat{A}, \alpha] = 0 \qquad \alpha \in \mathbb{C}$$

3 - المبادل تابع متجانس في متحوليه

$$[\alpha \hat{A}, \beta \hat{B}] = \alpha\beta [\hat{A}, \hat{B}] \qquad \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

وبحسب الخاصة الثانية نرى ان المبادل تابع جمعي في متحوليه (سواء من اليسار او اليمين) وبناء عليه فإن المبادل خطي في متحوليه .

4 - يتآلف كل موئثر $\hat{A}$ وأية قوة $\hat{A}^n$ فيه . وكذلك يتآلف $\hat{A}$ وكل كثير حدود $P_m(\hat{A}) = \sum_{k=1}^{m} \alpha_k A^k$. اكثر من هذا ، واذا كان $f(\hat{A})$ تابعا نظاميا (تحليليا) في الموئثر A فانه يكون متآلفا معه ،

$$[\hat{A}, f(\hat{A})] = [\hat{A}, \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\hat{A}-\hat{C})^k}{k!} f^{(k)}(C)]$$

حيث إن $\hat{C}$ موئثر ثابت .

٥ - بالاعتماد على المثال ٣ من §(2.3) وعلى الحقيقة ٣ من البند الحالي نجد ان

$$[x, -i\hbar\, \partial/\partial x] = i\hbar$$

٦ - في ميكانيك الكم تُمثَّل مركبات الدفع $\underline{P} = p_x i + p_y j + p_z k$ بالمؤثرات

$$\hat{p}_x = -i\hbar\, \partial/\partial x \;,\; \hat{p}_y = -i\hbar\, \partial/\partial y \;,\; \hat{p}_z = -i\hbar\, \partial/\partial z$$

وتُمثَّل مركبات شعاع الموضع $\underline{r} = xi + yj + zk$ بالمؤثرات

$$\hat{x} = x \;,\; \hat{y} = y \;,\; \hat{z} = z$$

ومن الواضح بحسب المثال السابق ان

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$$

§ (3.4) تمارين

١ - برهن ان مؤثرات الموضع متآلفة

$$\hat{0} = [x, x] = [x, y] = \ldots = [z, y] = [z, z]$$

وأن مؤثرات الدفوع متآلفة ايضا

$$\hat{0} = [\hat{p}_x, \hat{p}_x] = [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = \ldots = [\hat{p}_z, \hat{p}_y] = [\hat{p}_z, \hat{p}_z]$$

٢ - لنضع $\underline{r} = x_1 i + x_2 j + x_3 k$ و $\underline{P} = p_1 i + p_2 j + p_3 k$. برهن أنه يمكن كتابة العلاقات التبادلية التي تحققها مؤثرات الاحداثيات والدفوع بالشكل

$$[x_n, x_m] = \hat{0} \;,\; [\hat{p}_n, \hat{p}_m] = \hat{0} \;,\; [\hat{x}_n, \hat{p}_m] = i\hbar\, \delta_{nm}$$

٣ - برهن ان

$$[V(x,y,z), \hat{p}_x] = i\hbar\, \partial V/\partial x$$

٤ - استنادا الى المثال ٦ من البند السابق اشرح ماالمقصود بالتمثيل

$$\underline{r} \rightarrow \hat{\underline{r}} \;,\; \underline{P} \rightarrow -i\hbar \nabla$$

٥ - ليكن $\hat{\underline{A}} = \hat{A}_1(\underline{r})\, i + \hat{A}_2(\underline{r})\, j + \hat{A}_3(\underline{r})\, k$. برهن ان

$$[\hat{\underline{A}}, \hat{\underline{P}}] = i\hbar\, div\, \underline{A}$$

6 - برهن ان

$$[\hat{p}_x , x^n] = -i\hbar\, n\, x^{n-1} \qquad (i)$$

$$[x, \hat{p}_x^{\,n}] = i\hbar\, n\, p_x^{n-1} \qquad (ii)$$

يُبرهَن على (i) بالاستفادة من التمرين 3 . اما البرهان على التمرين الثاني (وكذلك الاول) فيتم بالاستقراء بدءاً من العلاقة $[x,p_x]=i\hbar$ ثم الاستفادة من خواص المبادل .

7 - برهن على ان

$$[x, F(x,p_x)] = i\hbar\, \partial F/\partial p_x$$

$$[\hat{p}_x, F(x,p_x)] = -i\hbar\, \partial F/\partial x$$

ملاحظة : انشر F في سلسلة قوى في x و p_x ثم استفد من التمرين 6 .

الزخم الزاوي

8 - تُمثَّل مركبات العزم الحركي بالمؤثرات

$$\hat{L}_1 = x_2 \hat{p}_3 - x_3 \hat{p}_2$$

$$\hat{L}_2 = x_3 \hat{p}_1 - x_1 \hat{p}_3$$

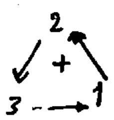
$$\hat{L}_3 = x_1 \hat{p}_2 - x_2 \hat{p}_1$$

برهن على ان

$$[\hat{L}_1, \hat{x}_1] = 0 \;,\; [\hat{L}_1, \hat{x}_2] = i\hbar\, \hat{x}_3 \;,\; [\hat{L}_1, \hat{x}_3] = -i\hbar\, \hat{x}_2$$

$$[\hat{L}_1, \hat{p}_1] = 0 \;,\; [\hat{L}_1, \hat{p}_2] = i\hbar\, \hat{p}_3 \;,\; [\hat{L}_1, \hat{p}_3] = -i\hbar\, \hat{p}_2$$

اذا التزمنا بالاصطلاح



$$\epsilon_{mnk} = \begin{cases} 0 & \text{اذا تساوى دليلان} \\ +1 & \text{اذا كانت الادلة مرتبة دوريا} \\ -1 & \text{اذا كانت الادلة غير دورية} \end{cases}$$

فبرهن على ان

$$[\hat{L}_m, \hat{p}_n] = i\hbar\, \epsilon_{mnk}\, \hat{p}_k$$

$$[\hat{L}_m, \hat{x}_n] = i\hbar\, \epsilon_{mnk}\, \hat{x}_k \qquad (m,n,k = 1,2,3)$$

$$[\hat{L}_m, \hat{L}_n] = i\hbar\, \epsilon_{mnk}\, \hat{L}_k$$

ان المعنى الدقيق للطرف الثاني في العلاقات السابقة يتطلب ان نجمع على الدليل المكرر k ، ومثلا $[L_m, L_n] = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{mnk} \hat{L}_k$. ولكنا لن نلتزم بهذا الاصطلاح ونفهم العلاقات التبادلية كما يلي :

١- اذا كانت $m=n$ فالطرف الثاني معدوم .

٢- اذا كانت $m \neq n$ ، يظهر في الطرف الثاني الدليل المتبقي من اصل الادلة الثلاثة ونرمز له ب k واشارته موجبة اذا كان (m,n,k) ترتيب دوري للاعداد $(1,2,3)$ وسالبة خلاف ذلك . مثلا

$$([L_3, L_2] = i\hbar\, \epsilon_{321} L_1 = -i\hbar L_1$$

§ 4 . تمثيل المؤثرات الخطية بمصفوفات

مادامت في فراغ شعاعي جملة كاملة من الاشعة ،فيمكن تمثيل كل مؤثرخطي على الفراغ بمصفوفة . وقد تكون هذه المصفوفة منتهية او غير منتهية تبعا لكون الفراغ منتهي البعد او غير منتهية . سنبدأ اولا باعتبار الفراغات المنتهية البعد وسيكون التعميم الى حالة الفراغات غير منتهية البعد امر مباشر .

§ (4.1) الطريقة

لتكن $B = \{\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n\}$ قاعدة في فراغ شعاعي V_n ، ليست بالضرورة مستنمدة . وليكن $\hat{A}$ موءثرا خطيا في V_N . يمكن نشر كل شعاع $\phi \in V_N$ بدلالة عناصر القاعدة B

$$\phi = \varphi_k \psi_k \qquad (4.1)$$

(حيث نلتزم هنا بمصطلح اينتشين في الحساب التنسوري، ويعني تكرار الدليل وفق هذا المصطلح جمعا يمتد على ذلك الدليل من 1 الى بعد الفراغ N . وهكذا فان $\sum_{k=1}^{N} \varphi_k \psi_k \equiv \varphi_k \psi_k$. اما ظهور دليل بشكل مفرد في علاقة ما فيعني ذلك N

علاقة منفصلة تنتج باعطاء هذا الدليل كل القيم من 1 الى N) .

تمثل φ_k في (4.1) مركبة ϕ على ψ_k . اذا كان g صورة ϕ وفق $\hat{A}$ ، فيمكن نشر g بدلالة عناصر القاعدة B بالشكل

$$\hat{A}\phi = g = g_i \psi_i \tag{4.2}$$

حيث g_i مركبة g على ψ_i . لكن وبحسب (4.1) نجد أن (4.2) تكتسب الصورة

$$g = \hat{A}(\varphi_k \psi_k) = \varphi_k \hat{A} \psi_k \tag{4.3}$$

واستنادا الى هذا يتعين g بمعرفة الاشعة

$$\hat{A}\psi_1 , \hat{A}\psi_2 , \ \ldots \ , \hat{A}\psi_N \tag{4.4}$$

أي أن صورة كل شعاع ϕ وفق $\hat{A}$ تتعين بالعلاقة (4.3) بعد معرفة صور عناصر القاعدة $\{\psi_i\}$ وفق $\hat{A}$. ولكن مادامت $\hat{A}\psi_k \in V_N$ ، اذن يمكن التعبير عنها بدلالة عناصر B

$$\hat{A}\psi_k = A_{ik}\psi_i \qquad (k = 1, 2, \ldots, N) \tag{4.5}$$

وبتعويض قيم صور عناصر القاعدة من (4.5) في (4.3) نجد

$$g = \hat{A}\phi = \varphi_k A_{ik} \psi_i \tag{4.6}$$

وبمقارنة هذه العلاقة مع (4.2) وملاحظة ان منشور كل شعاع بدلالة عناصر القاعدة وحيد نجد

$$g_i = A_{ik}\varphi_k \qquad (i = 1, 2, \ldots, N) \tag{4.7}$$

تكتب العلاقة (4.7) بالشكل الصريح التالي

$$\begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2N} \\ \vdots & & & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & & A_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_N \end{bmatrix} \tag{4.8}$$

تسمى المصفوفة $[A_{ik}]$ المصفوفة الممثلة للمؤثر الخطي $\hat{A}$. نلخص النتائج التي حصلنا عليها في هذا البند بما يلي :

١- لمعرفة المصفوفة الممثلة لمؤثر خطي $\hat{A}$ بالنسبة الى قاعدة $\{\psi_i\}$ معطاة في V_N :

تعبر عن صور عناصر القاعدة وفق $\hat{A}$ وهي $\hat{A}\Psi_k$ بدلالة عناصر القاعدة، وليكن $A\Psi_k = A_{ik}\Psi_i$.

نضع A_{ik} في جدول مربع حيث يرمز i الى رقم سطر A_{ik} ويرمز k الى رقم عموده . بعبارة ثانية نضع مركبات $A\Psi_k$ عمودا رقمه k في مصفوفة التمثيل .

٢ • لمعرفة اثر المؤثر $\hat{A}$ في شعاع ϕ من فراغ شعاعي V_N ،

تمثل الشعاع ϕ بعنصر من $\mathbb{C}^N$ وذلك عن طريق التعبير عنه بدلالة عناصر القاعدة $\phi = \varphi_k \Psi_k$ ، ويكون $(\varphi_1, \ldots, \varphi_N) \in \mathbb{C}^N$ ونضع هذا الاخير على شكل شعاع عمود (مصفوفة ($N \times 1$)) .

$$\begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_N \end{bmatrix}$$

• نمثل المؤثر $\hat{A}$ بمصفوفة ($N \times N$) ولتكن $[A_{ik}]$

• تعطى مركبات الشعاع $g = \hat{A}\phi$ ولتكن g_i كجداء داخلي للسطر i من المصفوفة الممثلة لـ $\hat{A}$ بالعمود الممثل لـ ϕ . أى

$$g_i = A_{ik}\varphi_k .$$

§ (4.2) حالة خاصة ، فراغ الجداء الداخلي :

اذا كان V_N فراغ جداء داخلي ، كما هي الحال في فراغ التوابع الموجية ، وكانت $\{\Psi_i\}$ قاعدة مستنمدة فيه ، فعندئذ نكتب (4.5) بالشكل

$$\hat{A}\Psi_k = \langle \Psi_i | A\Psi_k \rangle \Psi_i$$

وبذلك تعطى عناصر المصفوفة الممثلة $[A_{ik}]$ بالعلاقة $A_{ik} = \langle \Psi_i | A\Psi_k \rangle$. واذا لاحظنا ان منشورى ϕ و g في هذه الحالة هما

$$\phi = \langle \Psi_i | \phi \rangle \Psi_i \quad , \quad g = \langle \Psi_i | g \rangle \Psi_i$$

رأينا ان (4.8) تؤول الى الشكل

$$\begin{bmatrix} \langle \psi_1 | g \rangle \\ \langle \psi_2 | g \rangle \\ \vdots \\ \langle \psi_N | g \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \psi_1 | A\psi_1 \rangle & \langle \psi_1 | A\psi_2 \rangle & \cdots & \langle \psi_1 | A\psi_N \rangle \\ \langle \psi_2 | A\psi_1 \rangle & \langle \psi_2 | A\psi_2 \rangle & \cdots & \langle \psi_2 | A\psi_N \rangle \\ \\ \langle \psi_N | A\psi_1 \rangle & \langle \psi_N | A\psi_2 \rangle & \cdots & \langle \psi_N | A\psi_N \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle \psi_1 | \phi \rangle \\ \langle \psi_2 | \phi \rangle \\ \\ \langle \psi_N | \phi \rangle \end{bmatrix}$$

§ (4.3) حالة الفراغ اللامنتهي البعد :

اذا كان V لامنتهي البعد ، ولكن توجد فيه بالطبع مجموعة كاملة من الاشعة المستقلة خطيا (والقابلة للعد) فان كل عنصر من الفراغ يُمثَّل بعمود غير منتهٍ في عدد مركباته ، وتُمثَّل المؤثرات عليه بمصفوفات لامنتهية الاسطر والاعمدة

$$\phi \longrightarrow \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \\ \end{bmatrix} \quad , \quad \hat{A} \longrightarrow \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \\ \\ \end{bmatrix}$$

§ (4.4) العمليات في المؤثرات والتمثيل :

اذا كانت $\{\psi_i\}$ قاعدة في V_N ومثّلنا المؤثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ بمصفوفتين $[\hat{A}]$ و $[B]$.

$$\hat{A} \longrightarrow [A_{ij}] \quad , \quad \hat{B} \longrightarrow [B_{ij}]$$

فيكون لدينا التمثيلات التالية للمؤثرات $\alpha\hat{A}$ و $\hat{A}+\hat{B}$ و $\hat{A}\hat{B}$:

$$(\alpha\hat{A}) \rightarrow [(\alpha A)_{ij}] = \alpha[A_{ij}] \equiv [\alpha A_{ij}]$$

$$(\hat{A}+\hat{B}) \rightarrow [(A+B)_{ij}] = [A_{ij}] + [B_{ij}] \equiv [A_{ij} + B_{ij}]$$

$$(\hat{A}\hat{B}) \rightarrow [(AB)_{ij}] = [A_{ij}][B_{ij}] \equiv [A_{ik}B_{kj}] \,.$$

برهان : لايجاد عناصر المصفوفة الممثلة لموءثر يكفي حساب صور عناصر القاعدة $\{\psi_i\}$ وفق ذلك الموءثر (سوف نلتزم هنا بمصطلح الجمع ايضا) .

$$(\alpha \hat{A})\psi_i = \alpha A\psi_j = \alpha A_{ij}\psi_i$$

$$\Rightarrow (\alpha A)_{ij} = \alpha A_{ij}$$

$$(A+B)\psi_j = A\psi_j + B\psi_j = A_{ij}\psi_i + B_{ij}\psi_i = (A_{ij}+B_{ij})\psi$$

$$\Rightarrow (A+B)_{ij} = A_{ij} + B_{ij}$$

$$(AB)\psi_j = A(B\psi_j) = A(B_{ij}\psi_i) = B_{ij}A\psi_i = B_{ij}A_{ki}\psi_k$$

$$\Rightarrow (AB)_{kj} = A_{ki}B_{ij}$$

ومن تعريف ضرب مصفوفة بعدد وجمع مصفوفتين وحاصل ضرب مصفوفتين نصل الى النتائج المطلوبة .

§ ٥. الموءثرات الهرميتية :

تمثل الملحوظات الفيزيائية في ميكانيك الكم بموءثرات ذات صفة خاصة وتسمى الموءثرات الهرميتية ، وقد نسميها ايضا موءثرات ذاتية الترافق برغم أنه ثمة فرق بين هذين المفهومين اذا شئنا الدقة الكاملة . وندعو القارىء المهتم بالموضوع الى مطالعة [3] .

§ (٥.١) تعريف :

نقول عن موءثر $\hat{A}$ معرف على فراغ التوابع الموجية انه هرميتي اذا كان

$$\langle \psi | A\phi \rangle = \langle A\psi | \phi \rangle$$

وذلك من أجل جميع التوابع ψ و ϕ . بالطبع تعني المساواة السابقة في فراغ التوابع الموجية ان

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \phi \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{A}\psi)^* \phi \, dx \quad (5.2)$$

لاحظ ان صفة الهرميتية تعني بحسب (5.1) ان ناتج الجداء الداخلي هو نفسه سواء اثر $\hat{A}$ في ϕ اولا أو في Ψ اولا . ويمكن اذن كتابة اى طرف من طرفي العلاقة (5.1) على الصورة التالية :

$$\langle \Psi | A | \phi \rangle$$

حيث يمكن $\hat{A}$ ان يوئثر في الجهة اليمنى او في الجهة اليسرى ثم يوءخذ الجداء الداخلي للتابع الحاصل والتابع الآخر ، ويكون الناتجان متساويين . وبالطبع لا يصح هذا الامر من أجل موءثر كيفي غير هرميتي .

§ (5.2) حقائق حول الموءثرات الهرميتية :

اذا كان $\hat{A}$ و $\hat{B}$ موءثرين هرميتين أمكن ان نضع الحقائق التالية :

١ . $\hat{A} + \hat{B}$ هرميتي .

٢ . $\hat{A}^2$ هرميتي .

٣ . $r\hat{A}$ (حيث ان r حقيقي) هرميتي .

٤ . كل كثير حدود $r_0 + r_1\hat{A} + \cdots + r_N\hat{A}^N$ حيث ان الامثال r_i حقيقية هو هرميتي .

٥ . اذا كان $\hat{A}$ و $\hat{B}$ يقبلان التبديل كان $\hat{A}\hat{B}$ هرميتي .

ان البراهين على كافة الحقائق السابقة بسيطة ، وتنتج مباشرة من التعريف (5.1) .

نبرهن مثلا على الحقيقة (5)

$$\langle \Psi | AB\phi \rangle = \langle A\Psi | B\phi \rangle = \langle BA\Psi | \phi \rangle = \langle AB\Psi | \phi \rangle$$

وقد بدلنا ترتيب الموءثرين في المرحلة الاخيرة لأنهما متآلفان فرضاً .

٦ . اذا كان $\hat{A}$ هرميتيا كان العدد $\langle A \rangle_\Psi$ المعرف بالعلاقة

$$\langle A\rangle_{\psi} = \langle \psi | A\psi \rangle$$

حقيقيا . يسمى $\langle A\rangle_{\psi}$ القيمة المتوقعة للمؤثر $\hat{A}$ عند الشعاع ψ .

برهان :

$$\langle \psi | A\psi \rangle = \langle A\psi | \psi \rangle \qquad (\text{بحسب هرميتية } \hat{A})$$

$$\langle \psi | A\psi \rangle = \langle A\psi | \psi \rangle^{*} \qquad (\text{الجداء الداخلي} * \text{- متناظر})$$

ينتج اذن ان

$$\langle \psi | A\psi \rangle = \langle \psi | A\psi \rangle^{*} \Rightarrow \langle \psi | A\psi \rangle \in \mathbb{R}$$

٧ . اذا كانت $[A_{ij}]$ المصفوفة الممثلة لمؤثر هرميتي $\hat{A}$ كان

$$A_{ij} = \langle \psi_i | A\psi_j \rangle = \langle A\psi_i | \psi_j \rangle = \langle \psi_j | A\psi_i \rangle^{*} = A_{ji}^{*}$$

ويعني هذا ان العنصر ذا السطر i والعمود j هو المرافق العقدى للعنصر ذى السطر j والعمود i . فالمصفوفة الممثلة لمؤثر هرميتي هي مصفوفة هرميتية :

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{21}^{*} & A_{31}^{*} \cdots & A_{N1}^{*} \\ A_{21} & A_{22} & A_{32}^{*} \cdots & A_{N2}^{*} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{N3}^{*} \\ \vdots & & & \\ A_{N1} & A_{N2} & A_{N3} \cdots & A_{NN} \end{bmatrix}$$

وبصورة خاصة تكون العناصر القطرية لهذه المصفوفة حقيقية .

§ (5.3) امثلة محلولة عن المؤثرات الهرميتية :

1. المؤثر $\hat{A} = x$ هرميتي . وبالفعل لدينا

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{*} x \phi \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (x\psi)^{*} \phi \, dx \qquad (\forall \psi, \phi)$$

وذلك لأن x حقيقي . بصورة عامة ، إن أي تابع حقيقي $V(x)$ هرميتي . ومؤثر

الطاقة الكامنة مثلا هرميتي .

2. المؤثر $\hat{A} = i\, d/dx$ هرميتي لأن

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*\left(i \frac{d\phi}{dx}\right) dx = i\psi^*\phi \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \left(i\frac{d\psi}{dx}\right)^* \phi\, dx$$

$$= 0 + \int_{-\infty}^{+\infty} \left(i\frac{d\psi}{dx}\right)^* \phi\, dx$$

أما سبب وضع نتيجة الحد الأول مساوية للصفر فيعود الى ان التوابع الموجية ϕ و ψ يجب ان تكون تربيعية المكاملة ، ومن ثم يجب ان تكون معدومة عند اللانهاية .

3. لقد انصب اهتمامنا حتى الآن على توابع $\psi(x)$ في متحول وحيد x وذلك من أجل التبسيط في الرموز . بالحقيقة ان اعتبار توابع موجية في الاحداثيات الثلاثة تعميم مباشر بسيط لما سبق . يكتب شرط الهرميتية من أجل توابع كهذه بالشكل

$$\iiint_{\text{الفراغ}} \psi^*(\underline{r})\hat{A}\,\phi(\underline{r})\, d\tau = \iiint_{\text{الفراغ}} (\hat{A}\,\psi(\underline{r}))^*\,\phi(\underline{r})\, d\tau$$

حيث ان $d\tau = dx\,dy\,dz$ هو عنصر الحجم .

ينتج من المثال السابق ومن الحقيقة (3) ان المؤثرات الممثلة لمركبات الدفع

$$\hat{P}_x = -i\hbar\, \partial/\partial x \quad , \hat{P}_y = -i\hbar\, \partial/\partial y \quad , \hat{P}_z = -i\hbar\, \partial/\partial z$$

هي مؤثرات هرميتية .

4. مؤثر الطاقة او مؤثر هاميلتون

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x,y,z)$$

$$= \frac{1}{2m}(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2) + V(x,y,z)$$

هرميتي وذلك لأنّ موئثرات الدفوع هرميتية بحسب المثال السابق ، فمربعاتهما اذن هرميتية بحسب الحقيقة (2) و V هرميتي بحسب المثال (1) اذن فالمجموع $\hat{H}$ هرميتي بحسب الحقيقة (1) .

5. تمثل مركبة العزم الحركي على المحور z بالموئثر

$$\hat{L}_z = -i\hbar\,(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x)$$
$$= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$$

رأينا ان $\hat{x}$ و $\hat{p}_y$ هرميتيان ومن الواضح انهما يقبلان التبديل ، اذن فجداوءهما $\hat{p}_y\hat{x}$ هرميتي بحسب الحقيقة (5) . تنطبق افادة مماثلة على الحد $\hat{y}\hat{p}_x$. اذن يكون $\hat{L}_z$ هرميتي .

§ 6. مرافق موئثـــر :

§ (6.1) تعريف :

ليكن $\hat{A}$ موئثرا خطيا . نطلق اسم المرافق الهرميتي لـ $\hat{A}$ على الموئثـــر $\hat{A}^{\dagger}$ المعرف بالعلاقة

$$\langle \hat{A}^{\dagger}\Psi|\Phi\rangle = \langle \Psi|A\Phi\rangle \qquad \forall\,\Psi,\Phi \tag{6.1}$$

ونقول ان $\hat{A}$ مترافق ذاتيا او ذاتي الترافق او هرميتي اذا كان :

$$\hat{A} = \hat{A}^{\dagger} \tag{6.2}$$

ومن الواضح ان هذا التعريف الجديد للموئثر الهرميتي يتفق تماما والتعريف السابق (5.1) .

§ (6.2) حقائق :

يمكن ان نضع تعريف الموئثر المرافق بالشكل $\langle A\Psi|\Phi\rangle = \langle\Psi|A^{\dagger}\Phi\rangle$ ، وذلك لأنّ

$$\langle A\Psi|\Phi\rangle = \langle\Phi|A\Psi\rangle^{*} = \langle A^{\dagger}\Phi|\Psi\rangle^{*} = \langle\Psi|A^{\dagger}\Phi\rangle$$

2. ينتج من تعريف المؤثر المرافق ان

$$(2.i)\quad (A^{\dagger})^{\dagger} = A \qquad (2.ii)\quad (\alpha A)^{\dagger} = \alpha^{*} A^{\dagger} \quad (\alpha \in \mathbb{C})$$

$$(6.3)\quad (2.iii)\quad (A+B)^{\dagger} = A^{\dagger} + B^{\dagger} \qquad (2.iv)\quad (AB)^{\dagger} = B^{\dagger} A^{\dagger}$$

$$(2.v)\quad (A^{n})^{\dagger} = (A^{\dagger})^{n} .$$

3. مهما يكن المؤثر الخطي $\hat{A}$ في فراغ التوابع الموجية فان المؤثرات

$$(6.4)\qquad \underline{A^{\dagger} A} \;,\; \underline{\tfrac{1}{2}(A + A^{\dagger})} \;,\; \underline{\tfrac{1}{2i}(A - A^{\dagger})}$$

تكون هرميتية .

4. اذا كانت $[A_{ij}]$ (المصفوفة الممثلة لموثر $\hat{A}$ فان المصفوفة $[A^{\dagger}_{ij}]$ الممثلة للمؤثر المرافق $A^{\dagger}$ تعطى بالعلاقة

$$(6.5)\qquad A^{\dagger}_{ij} = A^{*}_{ji}$$

أى نحصل على عناصر المصفوفة $[A^{\dagger}_{ij}]$ بأخذ منقول المصفوفة $[A_{ij}]$ ثم اخـــذ المرافق العقدى لكل عنصر (او العكس) . أى أن

$$(6.6)\qquad A^{\dagger}_{ij} = \tilde{A}^{*}_{ij} = \tilde{A^{*}}_{ij} = A^{*}_{ji}$$

بصورة خاصة اذا كان $\hat{A}$ هرميتيا كان $A^{\dagger}_{ij} = A_{ij}$ وكان بالتالي $A_{ij} = A^{\dagger}_{ij} = A^{*}_{ji}$.
هذا ويدل الرمز ~ على المنقول .

برهان :

$$A^{\dagger}_{ij} = \langle \psi_i | A^{\dagger} \psi_j \rangle = \langle A^{\dagger}\psi_j | \psi_i \rangle^{*} = \langle \psi_j | A \psi_i \rangle^{*} = A^{*}_{ji}$$

<u>§ (6.3) تمارين</u>

1. برهن صحة الحقائق (2.i) - (2.v) في § (6.2)

برهان (2.i) :

$$\langle \Psi | A \Phi \rangle = \langle A^{+} \Psi | \Phi \rangle = \langle \Psi | (A^{+})^{+} \Phi \rangle \qquad \forall \Psi, \forall \Phi$$

وبما ان هذه العلاقة صحيحة من أجل كل تابع Ψ فنجد بحسب الحقيقة (5) من بحث الجداء الداخلي (§ 2.5)) أن

$$(A^{+})^{+} \Phi = A \Phi \qquad \forall \Phi$$

ونستدل من هذه العلاقة على ان $A^{++} = A$ بحسب تعريف تساوى موءثرين .

برهان : (2.ii)

$$\langle \Psi | \alpha \hat{A} \Phi \rangle = \alpha \langle \Psi | A \Phi \rangle = \alpha \langle A^{+} \Psi | \Phi \rangle = \langle \alpha^{*} A^{+} \Psi | \Phi \rangle$$

ومن ناحية ثانية

$$\langle \Psi | \alpha \hat{A} \Phi \rangle = \langle (\alpha A)^{+} \Psi | \Phi \rangle$$

بمقارنة النتيجتين السابقتين نجد أن

$$\langle \alpha^{*} A^{+} \Psi | \Phi \rangle = \langle (\alpha A)^{+} \Psi | \Phi \rangle \qquad \forall \Psi, \Phi$$

وبمحاكمة مماثلة لما قدمناه قبل قليل نجد أن : $(\alpha A)^{+} = \alpha^{*} A^{+}$.

برهان (2.iv) :

$$\langle \Psi | A B \Phi \rangle = \langle A^{+} \Psi | B \Phi \rangle = \langle B^{+} A^{+} \Psi | \Phi \rangle$$

ومن ناحية ثانية :

$$\langle \Psi | A B \Phi \rangle = \langle (AB)^{+} \Psi | \Phi \rangle$$

وبمقارنة النتيجتين نجد أن $(AB)^{+} = B^{+} A^{+}$.

يمكن تعميم هذه النتيجة الى جداء n موءثرا ويكون

$$(A_1 A_2 \cdots A_n)^{+} = A_n^{+} \cdots A_2^{+} A_1^{+} .$$

يتم برهان (2.iii) و (2.v) بطريقة مماثلة .

2. برهن صحة الحقائق (3) .

يجرى البرهان على هرميتية هذه الموءثرات باظهار ان كلاً منها مساو لمرافقه بالفعل ، وبالاعتماد على الحقائق (2) التي برهنا عليها في التمرين السابق نجد

$$(A^\dagger A)^\dagger = A^\dagger A^{\dagger\dagger} = A^\dagger A$$

$$\left[\tfrac{1}{2}(A+A^\dagger)\right]^\dagger = \tfrac{1}{2}(A^\dagger + A^{\dagger\dagger}) = \tfrac{1}{2}(A+A^\dagger)$$

$$\left[\tfrac{1}{2i}(A-A^\dagger)\right]^\dagger = \left(\tfrac{1}{2i}\right)^* (A^\dagger - A^{\dagger\dagger}) = \tfrac{1}{2i}(A-A^\dagger)$$

٣. برهن انه يمكن كتابة كل موثر خطي A ومرافقه $A^\dagger$ بالشكل

$$A = X + iY \quad , \quad A^\dagger = X - iY$$

حيث ان X و Y موثران هرميتيان .

برهان : بأخذ

$$X = \tfrac{1}{2}(A+A^\dagger) \qquad A^\dagger = \tfrac{1}{2i}(A-A^\dagger)$$

نحصل على النتيجة المطلوبة .

٤. برهن على صحة الحقائق (5.1) في (§ (5.2)) .

كنا قد برهنا على هذه الحقائق باستخدام تعريف الهرميتية (5.1) في § (5.1) .
الآن وباستخدام التعريف الآخر للهرميتية (6.2) في § 6 ، وباستخدام الحقائق
§ (6.2) من هذا البند نجد بعد ملاحظة ان $\hat{A}$ و $\hat{B}$ هرميتيان مايلي

$$(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger = A + B$$

$$(A^2)^\dagger = (A^\dagger)^2 = A^2$$

$$(rA)^\dagger = r^* A^\dagger = rA \qquad (r \in \mathbb{R})$$

$$(r_0 I + r_1 A + \cdots + r_n A^n)^\dagger = r_0 I^\dagger + r_1 A^\dagger + \cdots + r_n (A^\dagger)^n$$
$$= r_0 I + r_1 A + \cdots + r_n A^n$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA = AB$$ (A و B يقبلان التبديل فرضا)

ـ. اذكر أياً من المؤثرات التالية هرميتياً . عين في الحالة التي لا يكون فيها المؤثر هرميتيا مرافقة الهرميتي .

$$\hat{A}_1 = i\hat{I} = i \quad , \hat{A}_2 = (1-i)I = 1-i \quad , \quad \hat{A}_3 = 2I = 2$$

$$\hat{A}_4 = \partial/\partial x \quad , \hat{A}_5 = \hat{p}_x \quad , \quad \hat{A}_6 = \hat{x}$$

$$\hat{A}_7 = \hat{x}\hat{p} \quad , \hat{A}_8 = \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \quad , \hat{A}_9 = \hat{x}\hat{p}^2\hat{x} \quad , A_{10} = \partial^2/\partial x^2$$

الجواب: المؤثرات $\hat{A}_1$ و $\hat{A}_2$ و $\hat{A}_4$ و A_7 ليست هرميتية ومرافقاتها الهرميتية هي

$$\hat{A}_1^\dagger = -i \,, \; A_2^\dagger = 1+i \;, \; \hat{A}_4^\dagger = -\partial/\partial x \,, \; \hat{A}_7^\dagger = \hat{p}\hat{x} = -i\hbar + \hat{x}\hat{p}$$

والمؤثرات المتبقية هرميتية . لاحظ انه برغم ان $\hat{x}$ و $\hat{p}$ هرميتيان الا ان جداؤهما $\hat{p}\hat{x}$ ليس هرميتيا . ولكن

$$\hat{A}_8 = \hat{A}_7 + \hat{A}_7^\dagger \quad , \hat{A}_9 = \hat{A}_7 A_7^\dagger$$

هرميتية كما برهنا على ذلك في التمرين (١).اما البرهان على أن $\hat{A}_4$ ليس هرميتيا فيتم بحساب مباشر او بملاحظة ان ($i\partial/\partial x$) هرميتي وان $\partial/\partial x = -i(i\partial/\partial x)$

$$\Rightarrow (\partial/\partial x)^\dagger = (-i)^\dagger (i\partial/\partial x)^\dagger = -\partial/\partial x$$

٧§. المعادلة الخاصة

§ (٧.١) تعاريف

ليكن لدينا مؤثر خطي كيفي $\hat{A}$. اذا وجد تابع $\psi \neq 0$ ، بشكل ان اثر $\hat{A}$ في هذا التابع يكافىء ضرب هذا التابع بعدد λ، قلنا ان ψ تابع خاص للمؤثر $\hat{A}$ يقابل القيمة الخاصة λ . يوجد عادة اكثر من تابع يحقق التعريف ونرمز اليها بـ ψ_n كما نرمز الى القيم الخاصة المقابلة بـ λ_n ، ويكون

$$A\psi_n = \lambda_n \psi_n \qquad n = 1, 2, 3, \dots \tag{7.1}$$

أما طريقة معرفة هذه التوابع والقيم فتتم بحل المعادلة السابقة والمسماة بالمعادلة الخاصة .

يجب ان نلاحظ ان كل تابع خاص معين الى ثابت ضرب ، بمعنى انه اذا كان ψ تابعا خاصا مقابلا للقيمة الخاصة λ فان $\alpha\psi$ (α عدد مركب كيفي) هو ايضا تابع

خاص يقابل القيمة الخاصة λ نفسها . تنتج هذه الحقيقة من خطية المؤثر $\hat{A}$ التي تقتضي انه متجانس

$$A(\alpha\Psi) = \alpha A\Psi = \alpha\lambda\Psi = \lambda(\alpha\Psi)$$

اذن عندما نتحدث عن تابع خاص ، فانما نعني مثلا لفراغ شعاعي $\alpha\Psi$ ، وعلى كل حال يمكن تحديد التابع الخاص الى عامل ضرب $e^{i\theta}$ (θ حقيقي كيفي) وذلك بعملية استنظام.

قد نصادف وجود عدة توابع خاصة مستقلة خطيا Ψ_1 و Ψ_2 و... و Ψ_m يقابل كل منها القيمة الخاصة λ . نقول عن مجموعة التوابع $\{\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_m\}$ انها كاملة اذا كانت اضافة اي تابع خاص آخر يقابل القيمة λ لها مرتبطة خطيا . فاذا كانت هذه المجموعة كذلك قلنا ان λ متحللة من المرتبة m .

تسمى مجموعة القيم الخاصة لمؤثر $\hat{A}$ طيفه ، ويرمز اليه بالرمز $sp(\hat{A})$. أي أن $sp(\hat{A}) = \{\lambda_n\}$ حيث ان λ_n قيمة خاصة لـ $\hat{A}$.

§ (7.2) نظريات

نظرية 1 :

اذا كانت λ قيمة خاصة للمؤثر الخطي $\hat{A}$ متحللة من المرتبة m ، فان مجموعة التوابع الخاصة المقابلة لها تؤلف فراغا شعاعيا جزئيا بعده m ، ويسمى الفراغ الخاص المتعلق بـ λ .

برهان : بما ان λ متحللة من المرتبة m اذن توجد مجموعة كاملة مؤلفة من m تابعا مستقلا خطيا $S = \{\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_m\}$ يقابل كل تابع منها القيمة الخاصة λ . اذا كان $\Psi_i, \Psi_j \in S$ فان

$$A(\alpha\Psi_i + \beta\Psi_j) = \alpha A\Psi_i + \beta A\Psi_j \tag{7.3}$$
$$= \alpha\lambda\Psi_i + \beta\lambda\Psi_j$$
$$= \lambda(\alpha\Psi_i + \beta\Psi_j) \qquad (\alpha, \beta \in \mathbb{C})$$

اذن فالتابع $(\alpha\psi_i+\beta\psi_j)$ تابع خاص لـ $\hat{A}$ يقابل λ . استنادا الى هذا تؤلف التوابع الخاصة المقابلة لـ λ فراغا شعاعيا جزئيا من فراغ التوابع الموجية، أما ان بعده يساوى m فيعود الى وجود مجموعة كاملة من m شعاعا مقابلا لـ λ ، وهي المجموعة $\mathcal{S}$.

ينتج من هذه النظرية ان كل تركيب خطي $\sum_{k=1}^{m}\alpha_k\psi_k$ هو تابع خاص لـ A يقابل القيمة الخاصة λ . من الواضح ايضا ان الفراغ الخاص المقابل لـ λ هو

$$Lin\,\mathcal{S}=\left\{\sum_{k=1}^{m}\alpha_k\psi_k:\alpha_k\in\mathbb{C},\ \psi_k\in\mathcal{S}\right\} \qquad (7.4)$$

وفي حالة خاصة لما تكون $m=1$ ، اى عندما تكون λ غير متحللة ، يكون الفراغ الخاص المتعلق بها $\{\alpha\psi_1:\alpha\in\mathbb{C}\}$ ، أى انه فراغ شعاعي وحيد البعد .

نظرية 2 :

القيم الخاصة لموءثر هرميتي حقيقية .

برهان : لتكن λ قيمة خاصة لموءثر هرميتي A تقابل التابع الخاص ψ . عندئذ

$$\langle\psi|A\psi\rangle=\langle A\psi|\psi\rangle$$
$$\Rightarrow\ \langle\psi|\lambda\psi\rangle=\langle\lambda\psi|\psi\rangle$$
$$\Rightarrow\ \lambda\langle\psi|\psi\rangle=\lambda^*\langle\psi|\psi\rangle$$
$$\Rightarrow\ \lambda=\lambda^*$$

نظرية 3 :

تكون التوابع الخاصة لموءثر هرميتي والمقابلة لقيم خاصة مختلفة متعامدة فيما بينها .

برهان : ليكن ψ_1 و ψ_2 تابعين خاصين يقابلان القيمتين الخاصتين λ_1 و λ_2 على الترتيب ولنفرض ان $\lambda_1\neq\lambda_2$. لدينا اذن بحسب الفرض

$$A\Psi_1 = \lambda_1 \Psi_1 \quad , \quad A\Psi_2 = \lambda_2 \Psi_2$$

$$< \Psi_1 | A\Psi_2 > = < A\Psi_1 | \Psi_2 >$$

ومنه نجد

$$< \Psi_1 | \lambda_2 \Psi_2 > = < \lambda_1 \Psi_1 | \Psi_2 >$$

$$\Rightarrow \quad \lambda_2 < \Psi_1 | \Psi_2 > = \lambda_1 < \Psi_1 | \Psi_2 >$$

$$\Rightarrow \quad (\lambda_2 - \lambda_1) < \Psi_1 | \Psi_2 > = 0$$

$$\Rightarrow \quad < \Psi_1 | \Psi_2 > = 0$$

ملاحظة : سوف نرى في احدى مسلمات ميكانيك الكم ان كل ملحوظ فيزيائي يمثل بموثر هرميتي ، وأن التوابع الخاصة لهذا الموثر توءلف مجموعة كاملة في فراغ التوابع الموجية . ويعني هذا ان كل تابع موجي يقبل النشر بدلالتها . ولذا سوف نفترض من الان ان الموءثرات الهرميتية التي نتعامل واياها تمثّل ملحوظات فيزيائية وان مجموعة توابعها الخاصة كاملة .

نظرية ٤ :

اذا كان الموءثران $\hat{A}$ و $\hat{B}$ يقبلان التبديل وكانت القيم الخاصة لاحدهما غير متحللة ، فان لهذين الموءثرين مجموعة كاملة مشتركة من التوابع الخاصة .

برهان : لنفرض ان $A\Psi = \lambda\Psi$ حيث ان λ غير متحللة . الآن وبالتأثير على طرفي العلاقة السابقة بالموءثر $\hat{B}$ نجد

$$B(\lambda\Psi) = BA\Psi = AB\Psi$$

$$\Rightarrow \quad A(B\Psi) = \lambda(B\Psi)$$

وتدل هذه العلاقة على ان $B\Psi$ تابع خاص للموءثر A مقابل القيمة الخاصة λ . ولكن λ غير متحللة ، اذن $B\Psi$ وبغض النظر عن ثابت ضرب μ ، هو Ψ نفسه . أي

$$B\Psi = \mu\Psi$$

تظهر هذه العلاقة ان ψ تابع خاص للمؤثر B ايضا .

نظرية 5 :

اذا كان A و B يقبلان التبديل كانت لهما مجموعة كاملة مشتركة من التوابع الخاصة .

برهان : لقد تعاملنا في النظرية 4 مع الحالة التي تكون فيها القيم الخاصة للمؤثر غير متحللة ، وسوف نعتبر هنا الحالة التي تكون فيها القيم الخاصة لـ $\hat{A}$ اوبعضها متحللة .

لنفرض أن

$$A\psi_j = \lambda \psi_j \tag{7.5}$$

حيث ان λ قيمة خاصة متحللة من المرتبة m . بالتأثير على طرفي هذه المعادلة من اليسار بالمؤثر $\hat{B}$ نجد

$$\hat{B}\hat{A}\psi_j = \hat{A}\hat{B}\psi_j = \lambda(\hat{B}\psi_j)$$

ويدل هذا على ان $B\psi_j$ شعاع خاص لـ $\hat{A}$ يقابل القيمة الخاصة λ ، وبحسب النظرية 1 يكون $\hat{B}\psi_j$ تركيبا خطيا في الاشعة الخاصة $\{\psi_j\}$ للمؤثر $\hat{A}$ والمقابلة للقيمة الخاصة λ :

$$B\psi_j = \sum_{k=1}^{m} b_{jk}\psi_k \tag{7.7}$$

وبضرب طرفي هذه العلاقة بثوابت $c_j\,(j=1,\dots,m)$ ثم جمع العلاقات الناتجة نجد

$$\hat{B}\sum_{j=1}^{m} c_j\psi_j = \sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{m} c_j b_{jk}\psi_k \tag{7.8}$$

$$= \sum_{k=1}^{m}\Big(\sum_{j=1}^{m} c_j b_{jk}\Big)\psi_k = \sum_{k=1}^{m}(\mu c_k)\psi_k$$

حيث وضعنا

$$\sum_{j=1}^{m} c_j b_{jk} = \mu c_k \qquad (k=1,2,\dots,m) \tag{7.9}$$

ولنكتب هذه العلاقات بالشكل

$$\sum_{j=1}^{m} (b_{jk} c_j - \mu \delta_{jk} c_j) = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{j=1}^{m} (b_{jk} - \mu \delta_{jk}) c_j = 0 \qquad (k=1, 2, \ldots, m)$$

وتوءلف هذه العلاقات جملة خطية متجانسة من m معادلة في المجاهيـــل $\{c_1, c_2, \ldots, c_m\}$. وشرط وجود حل غير تافه (غير صفري) لهذه الجملة هو انعدام معين امثالها . أي

$$\begin{vmatrix} b_{11}-\mu & b_{12} & \cdots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22}-\mu & \cdots & b_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mm}-\mu \end{vmatrix} = 0 \qquad (7.11)$$

وبنشر هذا المعين نحصل على معادلة من الدرجة m في μ ، ولهذه المعادلة m جذرا . يقابل كل جذر μ_i حلا $(c_1^{(i)}, \ldots, c_m^{(i)})$ لجملة المعادلات (7.10). لنضع

$$u_i = \sum_{j=1}^{m} c_j^{(i)} \psi_j \qquad (i = 1, 2, \ldots, m) \qquad (7.12)$$

وباستبدال u_i بالتركيب الخطي في الطرف الاول ل (7.8) نجد

$$B u_i = \sum_k \mu_i c_k^{(i)} \psi_k = \mu_i u_i \qquad (7.13)$$

وكذلك نجد

$$A u_i = A\left(\sum_{j=1}^{m} c_j^{(i)} \psi_j\right) = \lambda\left(\sum_{j=1}^{m} c_j^{(i)} \psi_j\right)$$

$$\Rightarrow \quad A u_i = \lambda u_i \qquad (7.14)$$

ان التوابع المعطاة بالعلاقة (7.12) مستقلة خطيا ، اما القيم الخاصة μ_i للموءثــر $\hat{B}$ فهي ليست بالضرورة متمايزة .

يمكن تطبيق الطريقة السابقة على كل قيمة خاصة لـ $\hat{A}$ سواء كانت متحللة او غير متحللة ، لنحصل على

$$A u_i = \lambda_i u_i \quad , \; B u_i = \mu_i u_i \qquad (7.15)$$

وبناء عليه تؤلف التوابع u_i مجموعة كاملة مشتركة للملحوظين $\hat{A}$ و $\hat{B}$.

نظرية 6 :

الشرط اللازم الكافي لكي يكون المؤثران $\hat{A}$ و $\hat{B}$ قابلين للتبديل هو أن تكون لهما مجموعة كاملة مشتركة مستقلة من التوابع الخاصة .

برهان : لزوم الشرط اذا كان $\hat{A}$ و $\hat{B}$ تبديليين ، كانت لهما بحسب النظرية السابقة مجموعة كاملة مشتركة من التوابع الخاصة $\{\phi_i\}$ وهذه المجموعة ليست متعامدة بالضرورة ولا سيما اذا وجدت قيمة خاصة متحللة . ولكن يمكن استعماد واستنظام التوابع $\{\phi_i\}$ لنحصل منها على مجموعة كاملة مشتركة من التوابع الخاصة المستقلة $\{\psi_i\}$

كفاية الشرط : لتكن $\{\psi_i\}$ مجموعة كاملة مستقلة من التوابع الخاصة المشتركة لـ $\hat{A}$ و $\hat{B}$ ، وليكن

$$\begin{aligned}
[A,B]\psi_i &= AB\psi_i - BA\psi_i \\
&= A(\mu_i\psi_i) - B(\lambda_i\psi_i) \\
&= \mu_i A\psi_i - \lambda_i \mu_i \psi_i \\
&= \mu_i \lambda_i \psi_i - \lambda_i \mu_i \psi_i = 0
\end{aligned}$$

اذا كان ϕ تابع ما ، فيمكن نشره بدلالة المجموعة الكاملة $\{\psi_i\}$ ، ويكون بسبب خطية $[A,B]$

$$[A,B]\phi = [A,B]\left(\sum_i c_i\psi_i\right) = \sum_i c_i [A,B]\psi_i = 0$$

وينتج من هذا ان $[A,B]$ هو المؤثر الصفر ، وعليه فان $\hat{A}$ و $\hat{B}$ يقبلان التبديل .

§ (7-3) المعادلة المميزة

بعد تمثيل مؤثر بمصفوفة ، يمكن حساب قيمة الخاصة دون اللجوء الى حل

المعادلة الخاصة مباشرة . لتكن $\{\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_N\}$ قاعدة في V_N . نمثل كل

$$\phi = \sum_{i=1}^{N} \varphi_i \psi_i$$

بعمود $(N\times1)$ ، ونمثل المؤثر $\hat{A}$ بدلالة القاعدة $\{\psi_k\}$ بمصفوفة $(N\times N)$ ، ولتكن $[\hat{A}]$. نكتب المعادلة الخاصة (7.1) بالشكل

$$(A - \lambda I)\phi = 0 \qquad (7.16)$$

حيث $I = I_N$ هو المؤثر المطابق في V_N . نكتب الان هذه العلاقة الاخيرة على الصورة

$$\begin{bmatrix} A_{11}-\lambda & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{22} & A_{22}-\lambda & \cdots & A_{2N} \\ \vdots & & & \\ A_{N1} & A_{N2} & \cdots & A_{NN}-\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_N \end{bmatrix} = \underset{\sim}{0} \qquad (7.17)$$

حيث ان $(\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_N)$ هي مركبات ϕ بالنسبة الى القاعدة $\{\psi_k\}$. تؤلف العلاقة الاخيرة جملة من N معادلة خطية متجانسة في N مجهولا φ_1 و φ_2 و ..... و φ_N . ان شرط وجود حل غير تافه لهذه الجملة هو انعدام معين الامثال ، أي

$$\det[A - \lambda I] = 0 \qquad (7.18)$$

حيث ان $[A-\lambda I]$ هي المصفوفة الممثلة للمؤثر $A-\lambda I$. تؤلف العلاقة (7.18) معادلة من الدرجة N في λ وجذورها هي القيم الخاصة لـ $\hat{A}$. تسمى المعادلة (7.18) المعادلة المميزة المتعلقة بالمؤثر $\hat{A}$.

§ (7.4) تمثيل مؤثر بدلالة اشعته الخاصة

ليكن $\hat{A}$ مؤثرا في فراغ التوابع الموجية ولنفرض ان $\{\psi_k\}$ هي جملة اشعته الخاصة في شكلها المستنمد وأن هذه الجملة كاملة . بناء على هذا يمكن ان نكتب كل تابع موجي بدلالة التوابع الخاصة $\{\psi_k\}$ ونمثله من ثم بعمود . تُمثَل بشكل خاص التوابع الخاصة $\{\psi_k\}$ بدلالة الجملة الكاملة $\{\psi_k\}$ نفسها بأعمدة جميع عناصرها معدومة سوى العنصر ذو الرقم k :

$$\psi_k = \sum_i <\psi_i|\psi_k> \psi_i = \sum_i \delta_{ik}\,\psi_i$$

ونرى من العلاقة الاخيرة ان جميع مركبات الشعاع ψ_k وهي δ_{ki} معدومة سوى المركبة k التي تساوى $\delta_{kk}=1$. استنادا الى هذا نرى أن

$$\psi_k = [\,0 \;\; 0 \;\; 0 \;\cdots\; 1 \;\; 0 \;\; 0 \;\cdots]^{\sim}$$

↓ العنصر ذو الرقم k

اما عناصر المصفوفة الممثلة للموئثر $\hat{A}$ فهي

$$A_{ij} = <\psi_i|A\psi_j> = <\psi_i|\lambda_j\psi_j> = \lambda_j<\psi_i|\psi_j> = \lambda_j\delta_{ij}$$

حيث ان λ_j هي القيمة الخاصة للموئثر $\hat{A}$ والمقابلة للشفاع الخاص ψ_j . تدل العلاقة الاخيرة على أن

$$A_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{if} \quad i \neq j \\ \lambda_j & \text{if} \quad i = j \end{cases}$$

اذن جميع عناصر المصفوفة $[A_{ij}]$ معدومة خلا عناصر القطر التي تساوى القيم الخاصة للموئثر $\hat{A}$. أى

$$[\hat{A}] = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & & \\ & \lambda_2 & & 0 & \\ & & \lambda_3 & & \\ & 0 & & \lambda_4 & \\ & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

اذا كان $\hat{B}$ موئثرا يتآلف و$\hat{A}$ تكون لهما بحسب النظرية (7.6) جملة كاملة $\{\psi_k\}$ من الاشعة الخاصة المستنمدة . وبدلالة هذه الجملة نرى أن $\hat{B}$ يُمثَّل بالمصفوفة

$$[B] = \begin{bmatrix} \mu_1 & & & \\ & \mu_2 & & 0 \\ & & \mu_3 & \\ 0 & & & \mu_4 \\ & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

حيث ان μ_k هي القيمة الخاصة للموئثر $\hat{B}$ المقابلة للشعاع الخاص ψ_k .

من الواضح أن المصفوفتين الممثلتين لـ $\alpha \hat{A} + \beta \hat{B}$ و AB تعطيان بمصفوفتين قطريتين :

$$[\alpha A + \beta B] = \begin{bmatrix} \alpha\lambda_1 + \beta\mu_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \alpha\lambda_2 + \beta\mu_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \alpha\lambda_3 + \beta\mu_3 & \cdots \\ & & & \end{bmatrix}$$

$$[AB] = \begin{bmatrix} \lambda_1\mu_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \lambda_2\mu_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \lambda_3\mu_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{bmatrix}$$

اذا كان $\hat{C}$ موئثرا يأخذ قيمة وحيدة فقط هي c . أى ان $\hat{C}\Psi = c\Psi$ مهما تكن Ψ فعندئذ يتآلف $\hat{C}$ مع $\hat{A}$ وضوحا ويمثل بمصفوفة قطرية جميع عناصرها تساوى c .
اذن يمثل $\hat{C}$ بالمصفوفة cI حيث I هي مصفوفة الواحدة :

$$[\hat{C}] = \begin{bmatrix} C & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & C & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & C & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & C & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots \end{bmatrix}$$

§ (7.5) تمارين :

١- برهن على ان الموئثر $\hat{A}:\mathbb{C}^3 \to \mathbb{C}^3$ المعرف بالمصفوفة القطرية $diag[2,-3,1]$ له القيم الخاصة 2 و 3- و 1 والمقابلة على الترتيب للاشعة الخاصة :

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad و \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad و \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

تحقق ان هذه الاشعة متثامدة .

عمم ماحصلت عليه من اجل موئثر معرف بمصفوفة قطرية $diag[\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_N]$

٢- لدينا موئثر $\hat{A}:\mathbb{C}^3 \to \mathbb{C}^3$ معرف بالمصفوفة القطرية $diag\ [2, 2, -3]$. استنتج قيمة الخاصة والتوابع الخاصة المقابلة . ماهو الفراغ الخاص الجزئي المقابل للقيمة الخاصة المتحللة $\lambda = 2$. اختر شعاعين خاصين متعامدين يقابلان $\lambda = 2$.

٣- احسب القيم الخاصة للموئثر الممثل بالمصفوفة

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & 5 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

٤- اوجد القيم الخاصة للمصفوفات الهرميتية التالية :

$$[S_x] = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , [S_y] = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , [S_z] = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

٥- اذا كان $P_m(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{m} \alpha_n \hat{A}^n$ كثير حدود في $\hat{A}$ وكان $\hat{A}\Psi = \lambda \Psi$ ، فبرهن على ان

$$(P_m(\hat{A}))\Psi = (P_m(\lambda))\Psi$$

اذا اخترنا مجموعة الاشعة الخاصة $\{\Psi_k\}$ للمؤثر $\hat{A}$ قاعدة فبرهن ان $P_m(\hat{A})$ يمثل بمصفوفة قطرية

$$[P_m(\hat{A})] = diag[P_m(\lambda_1), P_m(\lambda_2), \dots]$$

٦- ليكن $\hat{A}$ و $\hat{B}$ متآلفين و $\{\Psi_k\}$ جملة كاملة مؤلفة من التوابع الخاصة المشتركة لهذين المؤثرين و λ_k و μ_k القيمتين الخاصتين لـ $\hat{A}$ و $\hat{B}$ على الترتيب والمقابلتين للشعاع الخاص Ψ_k . وليكن $F(\hat{A},\hat{B})$ تابعا نظاميا في $\hat{A}$ و $\hat{B}$ (يقبل النشر وفق تايلور فيهما) . برهن ان $F(\hat{A},\hat{B})$ يمثل بمصفوفة قطرية

$$diag[F(\lambda_1,\mu_1), F(\lambda_2,\mu_2), \dots] .$$

* * *

الفصل الرابع

أسس ميكانيك الكم

§٤ ١ـ المبادئ العامة لميكانيك الكم

عندما نحاول تطبيق قواعد الميكانيك والالكتروناميك الكلاسيكيان لتفسير الظواهر الذرية نحصل على نتائج تتناقض بشكل جلي مع التجربة . يبرز هذا التناقض بحدة عندما نطبق الالكترودايناميك المألوف على النماذج الذرية التي يدور فيها الالكترون بمدار معين حول النواة . خلال حركة من هذا النوع يجب أن يصدر الالكترون . كما هي الحال في كل حركة مسرّعة ، امواجا كهرطيسية بصورة مستمرة، مما يؤدي الى خسران مستمر في طاقته وسقوطه في النهاية على النواة . ولهذا فان الذرة بحسب الالكتروناميك الكلاسيكي غير مستقرة .

يؤلف التناقض الحاد بين النظرية الكلاسيكية والتجربة مؤشرا على أن بناء نظرية تنطبق على الظواهر الذرية يتطلب تعديلا جوهريا في مفاهيم الفيزياء الكلاسيكية وقوانينها . يمكن ان نختار كنقطة بدء في بحثنا عن التعديلات الواجب ادخالها في الفيزياء الكلاسيكية ، الظاهرة التجريبية المعروفة باسم انعراج الالكترونات فلقد لوحظ أنه عندما تمر حزمة متجانسة من الالكترونات عبر بلورة فان الحزمة الصادرة تبدى نمطا متناوبا من النهايات العظمى والصغرى للشدة ، يشابه تماما نمط (أولوحة) الانعراج الملاحظ في الامواج الكهرطيسية . استنادا الى هذا وتحت ظروف معينة تبدى الجسيمات المادية سلوكا موجياً .

لكي نستوعب الى أى مدى تتعارض هذه التجربة والمفاهيم المألوفة نتصور

التجربة التخيلية التالية ، وهي نموذج مثالي لتجربة انعراج الالكترون بالبلورة.
لنفترض وجود حاجز B لا تستطيع الالكترونات اختراقه ، وقد صنع به شقان صغيران.
ولدى ملاحظة مرور حزمة متجانسة من الالكترونات عبر الشق الاول على حين نبقي الثاني مغلقا ، نحصل على نمط معين لتوزع الشدة . بالطريقة نفسها وبفتح الشق الثاني واغلاق الأول نحصل على نمط آخر للشدة . ولدى ملاحظة مرور الحزمة عبر الشقين، نتوقع بناء على المفاهيم الكلاسيكية المألوفة ، أن يكون النمط الناتج تركيب جمعي بسيط للنمطين السابقين . فبحسب المفاهيم المألوفة يتحرك كل الكترون في مسار خاص به مارا تبعا لذلك بأحد الشقين دون أن يكون له أي تأثير على الالكترونات المارة عبر الشق الآخر . ولكن ظاهرة انعراج الألكترون تُظهر بأننا نحصل في الواقع، وبسبب التداخل ، على نمط انعراج لا تساوى الشدة فيه ابدا ، مجموع الشدتين السابقتين . ومن الواضح ان هذه النتيجة لا يمكن التوفيق مطلقا بينها وبين حركة الالكترون في مسار .

وهكذا نرى ان الميكانيك الذى يحكم الظواهر الذرية - وهو ميكانيك الكم أو الميكانيك الموجي - يجب أن يبنى على مفاهيم للحركة تختلف جذريا عن مفاهيم الميكانيك الكلاسيكي لها . ليس ثمة في ميكانيك الكم مفهوم كمفهوم مسار جسيم. تؤلف العبارة الأخيرة فحوى مايسمى بمبدأ الارتياب او مبدأ الشك الذى اكتشفه هايزنبرغ عام / 1927/ وهو يشكل احد مبادئ ميكانيك الكم الاساسية.

في كونه يرفض المفاهيم المألوفة للميكانيك الكلاسيكي ، يمكن وصف مبدأ الارتياب بأنه سلبي في محتواه . وبالطبع فهذا المبدأ لا يشكل اساسا ننشئ عليه ميكانيك جديد للجسيمات الذرية . ان بناء هذه النظرية الجديدة يتطلب وضع مبادئ ايجابية وسوف نتعرض لهذه المبادئ بشكل مفصل لدى الحديث عن مسلمات ميكانيك الكم.
من اجل ان نستوعب دواعي هذه المبادئ الايجابية لبناء ميكانيك الكم لابد لنا من ان نبين طبيعة المشاكل التي تجابه ميكانيك الكم ، ومن أجل ذلك نتفحص اولا طبيعة العلاقة الخاصة بين ميكانيك الكم والميكانيك الكلاسيكي . يمكن عادة صياغة نظرية عامة بشكل منطقي متكامل وبصورة مستقلة عن نظرية اقل عمومية وتؤلف حالة حدية

تنتهي اليها النظرية العامة تحت شروط معينة . ولكن من المستحيل من حيث المبدأ صياغة المفاهيم الاساسية لميكانيك الكم دون استعمال الميكانيك الكلاسيكي . ان حقيقة فقــــدان الالكترون لمسار معين ، يعني انه ليس له ايضا ميزات ديناميكة ملازمــة ولهذا فانه من غير الممكن انشاء نظرية ميكانيكية لجملة تتألف فقط من اجسام كوانتيــة طالما انه ليس لهذه الاجسام خصائص ديناميكية تلازمها . ان امكانية وصف حركـــة الالكترون وصفا كميا (غير كيفي) يتطلب وجود اجسام فيزيائية تخضع لقوانين الميكانيك الكلاسيكي بدرجة كافية من الدقة . وعندما يتفاعل الكترون مع " جسم كلاسيكي " فان حالة هذا الجسم تتغير ، وطبيعة وشدة هذا التغير تتعلق بحالة الالكترون ، ويمكن مـــن ثم ان يخدم فـــــي وصف وتمييز حالة الالكترون بصورة كمية .

يدعى الجسم المادى الذى يتفاعل معه الالكترون " اداة او جهاز قياس" ويطلق على عملية تفاعل الالكترون مع هذه الاداة عملية قياس . نقصد اذن بعملية القيـــاس في ميكانيك الكم اى تفاعل بين اجسام كلاسيكية واجسام كوانتية ، وهي تحدث بغـــض النظر عن وجود المراقب وبصورة مستقلة عنه .

نعرّف اذن " اداة القياس " بأنها جسم فيزيائي تحكمه الى درجة كافية مـــن الدقة قوانين الميكانيك الكلاسيكي . ومن امثلة هذه الأدوات جسم مادي ذو كتلـــة كبيرة بما فيه الكفاية ، وليس من الضرورة ان يكون هذا الجسم ماكروسكوبياً . تحـــت بعض الظروف يمكن أن يؤدي دور الأداة جسم ميكروسكوبي ، طالما ان فكرة " الدقـــة الكافية " تتوقف على المسألة المطروحة . ومثلا نراقب حركة الالكترون في حجـــــرة ويلسون عن طريق الاثر السحابي الذى يتركه ، وسماكة هذا الاثر كبيرة بالمقارنة مـــع الابعاد الذرية . عندما يتعين المسار بدقة ضئيلة كهذه فان الالكترون يمكن ان ننظر اليه كجسم كلاسيكـــي .

يتبين لنا مما سبق ان ميكانيك الكم يشغل مكاناً غير عادي بين النظريـــــات الفيزيائية ، فهو يحتوي الميكانيك الكلاسيكي كحالة حدية فيه ، وبرغم هذا فهو يتطلــب وجود هذه الحالة الحدية من اجل صياغته .

من المسائل النموذجية التي تجابه ميكانيك الكم مسألة تحديد نتائج قياسات لاحقة من نتائج سابقة معروفة سلفا . سوف نرى فيما بعد ان الميكانيك الكوانتي وبالمقارنة مع الميكانيك الكلاسيكي يقيد مجال القيم التي تأخذها الملحوظات الفيزيائية (الطاقة مثلا) . أى انه يضيّق مجموعة القيم التي يمكن ان نحصل عليها كنتيجة لقياس الكمية المعتبرة . ويجب ان تكون طرائق ميكانيك الكم قادرة على حل هذه المسألة وتعيين القيم المسموح بها لملحوظ فيزيائي ما .

تتصف عملية القياس في ميكانيك الكم بخاصة مهمة جدا . وهي انها تؤثر دوما على الالكترون الذى تجرى عليه وانه من غير الممكن من حيث المبدأ ان نجعل هذا الاثر،من اجل دقة معطاة سلفا في المسألة،صغيرا بالقدر الذى نشاوء.وترتبط هذه الخاصة للقياس ارتباطا منطقيا بحقيقة ظهور الخصائص الديناميكية للالكترون كنتيجة لعملية القياس فقط ، ومن الواضح انه لو امكن جعل اثر عملية القياس في الجسم صغيرا بالقدر الذى نريده،فان هذا يعني ان الكمية المقيسة تلازمها قيم مستقلة عن عملية القياس .

من بين انواع القياس المختلفة يلعب قياس احداثيات الالكترون دورا اساسيا. وضمن الحدود التي ينطبق فيها ميكانيك الكم يمكن قياس احداثيات الالكترون بالدرجة التي نريدها من الدقة . لنفرض انه تم اجراء سلسلة من القياسات لاحداثيات الالكترون على فواصل زمنية متساوية Δt . ولن تقع النتائج التي نحصل عليها على منحن ناعم ، بل على العكس ، وكلما كانت عملية القياس ادق كانت نتائجنا غير مستمرة ومشتتة ، وهو ما يتفق مع عدم وجود مسار للالكترون.ويمكن الحصول على مسار ناعم نسبيا اذا تم قياس الاحداثيات بدرجة منخفضة من الدقة ، كما يحدث مثلا في تكاثف قطرات البخار في حجرة ويلسون .

اذا تركنا دقة القياس دون تغيير وقلصنا المجالات الزمنية Δt التي تفصل بين القياسات المتعاقبة ، عندئذ تعطي نتائج القياس قيما متقاربة للاحداثيات. لكن وبرغم ان هذه النتائج تقع في منطقة صغيرة من الفراغ الا انها تتوزع بشكل غير نظامي

واذا جعلنا Δt تسعى الى الصفر نرى أن نتائج القياسات المتجاورة لا تسعى لتقع على خط مستقيم .

يُظهر هذا أنه ليس ثمة في ميكانيك الكم مفهوم "كسرعة جسم" بالمعنى الكلاسيكي للكلمة ، أي كنهاية للفرق بين الاحداثيات عند لحظتين مقسوما على الفاصل لزمني Δt عندما تسعى Δt الى الصفر . على حين يملك الجسيم في الميكانيك الكلاسيكي موضعا وسرعة في كل لحظة،فالأمر يختلف جذريا في ميكانيك الكم . فاذا وجد بالقياس ان للالكترون موضع معين تماما فعندئذ ليس له أية سرعة معينة، وبالعكس واذا كان للالكترون سرعة معينة فلا يمكن ان يكون له موضع معين ، وذلك لأن الوجود المتواقت للاحداثيات والسرع يعني وجود مسار معين وهو شيء لا يملكه الالكترون . استنادا الى هذا فان السرع والاحداثيات في ميكانيك الكم كميات لا يمكن قياسها معا . اى لا يمكن ان يكون لها في الوقت نفسه قيما معينة . يمكن القول اذن ان احداثيات الالكترون ودفوعه كميات غير موجودة في آن واحد .

يتم التعيين الكامل لحالة جملة في الميكانيك الكلاسيكي بتعيين احداثياتها وسرعها في لحظة ما ، وبهذه المعطيات الابتدائية تُعيِّن معادلات الحركة سلوك الجسم في كل اللحظات اللاحقة . اما في ميكانيك الكم فوصف كهذا مستحيل،من حيث المبدأ ، وذلك لان الاحداثيات والسرع كميات لا توجد في آن واحد . واستنادا الى هذا يتم وصف الحالة في الميكانيك الكوانتي بعدد اقل من الكميات الديناميكية التي توصف بها في الميكانيك الكلاسيكي ، وبهذا فهو أقل تفصيلا من الميكانيك الكلاسيكي .

ينتج من هذا نتيجة بالغة الأهمية بخصوص طبيعة التنبوءات التي يمكن التحدث عنها في ميكانيك الكم . فبينما يكفي الوصف الكلاسيكي لتعيين الحركة المستقبلية لجملة ميكانيكية بدقة كاملة ، لا يستطيع الوصف الكوانتي الأقل تفصيلا تقديم نبوءات مستقبلية مماثلة لتنبوءات الميكانيك الكلاسيكي . ويعني هذا انه حتى اذا كان الالكترون موصوفا الى ابعد حد ممكن في ميكانيك الكم فان سلوكه في اللحظات

اللاحقة يكون ، من حيث المبدأ ، غير حتمي . ولا يستطيع ميكانيك الكم تقديم تنبؤات معينة تماما بخصوص السلوك المستقبلي للالكترون . فمن اجل حالة معطاة للالكترون يمكن ان تعطي تجربة قياس لاحقة نتائج مختلفة . والمسألة المطروحة في ميكانيك الكم هي تحديد الاحتمالات المختلفة الموافقة للحصول على النتائج المختلفة كافة . من المفهوم انه في بعض حالات الالكترون يكون احتمال الحصول على قيمة معينة مساويا للواحدة، اى انه مؤكد ، ولذلك تكون قيمة هذه القياس في الحالة المعطاة للالكترون وحيدة .

من الممكن ان نقسم عمليات القياس في ميكانيك الكم الى صفين رئيسيين . يضم الصف الاول معظم القياسات ، ولا تقود تجربة القياس فيه بشكل اكيد الى قيمة وحيدة. ويضم الصنف الثاني القياسات التي يوافق فيها كل نتيجة ممكنة للقياس حالة للجملة تقود من اجلها عملية القياس بصورة محتمة الى تلك النتيجة . تسمى القياسات الاخيرة " قياسات يمكن التنبوء بها " وهي تلعب دورا هاما في ميكانيك الكم .

سوف نرى فيما بعد انه لا يمكن قياس مجموعة اختيارية من الملحوظات الفيزيائية معا . أى أن نحصل على قيم معينة لهذه الملحوظات في الوقت نفسه ، ولقد ذكرنا من قبل مثال احداثيات ودفوع الالكترون . ومن بين الملحوظات المختلفة في ميكانيك الكم مجموعة ملحوظات تلعب دورا مهما فيه، وتتصف بانها قابلة للقياس في الوقت نفسه، واذا كان لهذه المجموعة قيم معينة فليس لأى ملحوظ فيزيائي آخر (ليس تابعا فيها) قيمة معينة في تلك الحالة للجملة . سوف نسمي مجموعة ملحوظات كهذه مجموعة تامة، وقد تتألف هذه المجموعة احيانا من ملحوظ واحد فقط .

يتم وصف أية حالة للالكترون عن طريق عملية قياس ، وتميز الحالة بنتيجة القياس. سوف نصيغ الان معنى الوصف الكامل للحالة في ميكانيك الكم . بالحقيقة تنشأ الحالات الموصوفة تماما كنتيجة لعملية قياس مشترك لجملة ملحوظات فيزيائية تامة .

سوف نضع في الفصل الاتي الاعتبارات السابقة على شكل مسلمات ونضع العلاقات الكمية والصيغ الرياضية التي تعبر عنها .

ـ المسلمة الاولى : حالة الجملة والتابع الموجي

مادام الحديث عن مسار جسيم ذرى فارغ المعنى ، فكيف نصل الى وصف حركته بالقدر الذى يسمح به ميكانيك الكم ؟ ان المعلومات التي يمكننا ان نعرفها عن حركة جسيم في ميكانيك الكم، ترتكز على حقيقة امكانية وصف حالة الجسيم في كل لحظة t بتابع في الاحداثيات $\Psi(\underline{r})$. يمثل مربع طويلة هذا التابع عند نقطة $\underline{r}$ كثافة احتمال وجود الجسيم عند تلك النقطة . وبناء على هذا تمثل الكمية $|\Psi(\underline{r})|^2 d\tau$ احتمال ان تعطي تجربة قياس قيما لاحداثيات الالكترون واقعة ضمن العنصر الحجمي $d\tau = dx\, dy\, dz$ حول النقطة $\underline{r}$. يسمى التابع Ψ التابع الموجي او تابع الحالة (او تابع السعة الاحتمالية) ولقد ادخله شرودنجر في ميكانيك الكم عام /1926/ .

بمرور الزمن تتغير حالة الجملة ، ومن ثم التابع الموجي الذى يصفها . ولهذا يمكن اعتبار التابع الموجي تابعا في الاحداثيات والزمن معا . اذا كان التابع الموجي معلوما في لحظة ما ، فيمكن تعيينه في كل لحظة لاحقة كما يدل على ذلك معنى الوصف التام للحالة والذى تحدثنا عنه في البحث السابق . اما المعادلة التي تعين تغير التابع الموجي كتابع في الزمن فسوف نتحدث عنها في المسلمة السابعة

من الواضح ان مجموع احتمالات كل القيم الممكنة لاحداثيات الجملة يساوى الواحد ، ولذلك يجب ان يكون تكامل الكثافة الاحتمالية على كل الفراغ الاحداثي مساويا للواحد

$$\|\Psi\|^2 = \int |\Psi|^2 d\tau = 1 \qquad (2.1)$$

تعبر هذه المعادلة عن شرط استنظام التوابع الموجية ، وهو شرط لا غنى عنه من اجل ان يكون التفسير الاحتمالي صالحاً . اذا كان تكامل مربع طويلة Ψ متقاربا :

$$\|\Psi\|^2 = \int |\Psi|^2 d\tau < \infty \qquad (2.2)$$

فيمكن في هذه الحالة تنظيم Ψ وذلك بقسمته على نظيمه ،ويكون $\Psi/\|\Psi\|$ مستنظماً . يجب ان نلاحظ ان التكاملات السابقة تمتد على الفراغ كافة . اما احتمال ان تقود تجربة قياس لاحداثيات الكترون الى قيم واقعة ضمن حجم τ فيساوى تكامل الكثافة الاحتمالية على ذلك الحجم

$$P = \int_{\tau} |\Psi|^2 d\tau \qquad (2.3)$$

اذا حدث وكان التكامل (2.2) متباعداً ،أى $\|\Psi\| = \infty$ فلا نستطيع آنئذ الحديث عن كثافة الاحتمال ،ولا تمثل الكمية $|\Psi|^2 d\tau$ هنا احتمال وجود الجسيم في عنصر حجمي $d\tau$. ولكن يمكننا الحديث عن كثافة الاحتمال النسبية أو الاحتمال النسبي ،أى عن احتمال وجود الجسيم عند نقطة $\underline{r}_1$ بالنسبة الى احتمال وجوده عند نقطة $\underline{r}_2$ في اللحظة t نفسها

$$P_r = |\Psi(\underline{r}_1,t)|^2 / |\Psi(\underline{r}_2,t)|^2 \qquad (2.4)$$

ان شرط الاستنظام (2.1) لا يعين Ψ بصورة وحيدة ، فاذا كان Ψ مستنظما فكذلك يكون $e^{i\theta}\Psi$ ،حيث ان θ اى عدد حقيقي . وعدم التعيين هذا لا يمكن ازالته ،وهذا غير مهم ، مادام المعنى الفيزيائي يعزى الى $|\Psi|^2$ وليس الى Ψ مباشرة .

نلخص مما سبق بالمسلمة التالية :

يقابل كل جملة فيزيائية فراغ من التوابع الموجية يرتبط بها . تمثل الحالة الفيزيائية للجملة بتابع $\Psi(\underline{r})$ من هذا الفراغ يسمى تابع الحالة او التابع الموجي .ونفسر الكمية $|\Psi(\underline{r},t)|^2$ على انها كثافة احتمال وجود الجسيم عند النقطة $\underline{r}$ في اللحظة t .

يختلف فراغ التوابع الموجية الذى نربطه بالجملة تبعا للجملة المدروسة، فاذا كان الجسيم محتجزا في المجال (o,a) من المحور ox (بئر كموني لا متناه في العمق) ،كان فراغ التوابع الموجية الموافق هو مجموعة التوابع التربيعية المكاملة على المجال (o,a) أى $\mathcal{L}^2(o,a)$ ، ويكون شعاع الحالة تابعا مركبا ψ معرفا على هذا المجال حيث يكون

$$\|\psi\|^2 = \int_0^a |\psi|^2 dx < \infty \qquad (2.5)$$

- المسلمة الثانية : I طيف الملحوظات الفيزيائية - II . تراكب الحالات

I- نسلم بأن كل ملحوظ فيزيائي A يُمثَّل بموئثر هرميتي $\hat{A}$ يوئثر في حالة الجملة ، وأن النتائج الممكنة لعملية قياس A هي مختلف القيم الخاصة λ_n للموئثر $\hat{A}$ (ونستعمل الرمز نفسه للدلالة على الملحوظ الفيزيائي وعلى الموئثر الذى يمثله) مادامت نتائج قياس ملحوظ فيزيائي ذات قيم حقيقية لذلك يجب ان تكون λ_n جميعا اعدادا حقيقية ،وهذا الطلب مضمون لأن $\hat{A}$ هرميتي . نسمي مجموعة القيم الخاصة لملحوظ $\hat{A}$ طيفه .

تحتوى هذه المسلمة في طيها خاصة بالغة الاهمية للفيزياء الكوانتية وهي انه لا يمكن ملحوظ فيزيائي ان يأخذ قيما كيفية كتلك التي يسمح بها الميكانيك الكلاسيكي. وبسبب ربط القيم الناتجة بالقياس لملحوظ فيزيائي بالقيم الخاصة للموئثر الممثل له، لذلك فان طيفا معينا من القيم المقيسة يُسمح له بالظهور . وبالحقيقة فطيف القيم الخاصة لموئثر هو غير مستمر بشكل عام ،او قد يحتوى على جزء غير مستمر ، وهكذا تعبر المسلمة I عن الحقيقة التجريبية للسويات الكوانتية .

II- نسلم ايضا ان كل ملحوظ فيزيائي $\hat{A}$ يملك مجموعة كاملة من التوابع الخاصة $\{\psi_n \mid n = 1, 2, 3, \dots\}$ ويمكن بحسب نظرية سابقة استناداً هذه المجموعة يمكن اذن نشر كل تابع حالة ψ بدلالة عناصر هذه المجموعة ،أى :

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi_n | \psi \rangle \psi_n \qquad (2.6)$$

اذا كان تابع الحالة ψ تابعا خاصا للملحوظ $\hat{A}$ ،فان نسميه تابع حالة خاصـــــة اوشعاعا خاصا أو حالة خاصة ، ونقول ان الجملة في الحالة الخاصة ψ .

ان تمثيل حالة كيفية كتركيب خطي في الحالات الخاصة لملحوظ ما (المعادلة (2.6)) هو التعبير الرياضي عن مبدأ تراكب الحالات في ميكانيك الكم . وســـوف تتجلى اهمية هذا المبدأ في ضوء المسلمة السادسة ، سوف نرى في هذه المسلمـــة انه في حالة كيفية للجملة يمكن ان نحصل لدى قياس ملحوظ فيزيائي على مختلف القيم الخاصة له ولكن باحتمالات مختلفة تتعلق بالعوامل c_n في المنشور (2.6) .ولهذا يقود مبدأ تراكب الحالات الى ظهور مختلف النتائج الممكنة لملحوظ فيزيائي ما ولكـن بشدات مختلفة وذلك عند ما نقيس قيمة هذا الملحوظ عند ما تكون الجملة مؤلفة من عدد وفير من النسخ المتطابقة والمحضّرة جميعا في الحالة نفسها ، تؤلف هذه الحقيقة السمة الفائقة الاهمية في ميكانيك الكم وهي خاصة تداخل الحالات .

يقود مبدأ تراكب الحالات ايضا الى ان نتيجة هامة ايضا وهي ان كـــل المعادلات التي يحققها التابع الموجي ψ يجب ان تكون خطية .

المسلمة الثالثة : تمثيل الملحوظات الفيزيائية

وفقا لصياغة هاميلتون للميكانيك الكلاسيكي يبنى كل ملحوظ كلاسيكي بدءا مـن أزواج من المتحولات المترافقة x_i و p_i وبذلك يكون لكل ملحوظ كلاسيكي الشكـل $f(x_i, p_i)$. تسمى x_i و p_i متحولات قانونية وهي تحقق معترضـــات بواصـــون

$$\{x_j, p_k\} = \delta_{jk} \quad , \{x_j, p_k\} = 0 \quad , \quad \{p_j, p_k\} = 0 \qquad (2.7)$$

في ميكانيك الكم يجب ان نمثل هذه المتحولات بمؤثرات هرميتية ، ومن الواضح بحسب مبدأ الشك أن احداثياً x_j والدفع المرافق $\hat{p}_j$ يجب ان يمثلا بمؤثرين هرميتيـن غير متآلفين ،والا لأمكن في قياس متواقت لهما معا الحصول على قيم مؤكدة لهمـــا وكان جداء الارتيابين في قيمتيهما معدوما . يقترح مبدأ الشك أيضا ان التغيـــرات

المتبادلة في قياس الدفع والموضع يجب ان تُربَط بثابت بلانك $\hbar$ ، ولذلك نفترض أن هذا التغيير يتناسب مع ثابت بلانك

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \alpha\hbar \tag{2.8}$$

حيث ان α عدد يجب تعيينه . يمكن ان نعرّف $\hat{x}$ بالشكل :

$$\hat{x}\Psi = x\Psi \qquad (\hat{x} = x.) \tag{2.9}$$

وبقي ان نضع التعريف الصريح لـ $\hat{p}$. لنعتبر جسيما حرا دفعه p وطاقته E ، فتكون حالته معينة بتابع دى بروى الموجي :

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \tag{2.10}$$

وبحسب المسلمة الثانية يكون :

$$\hat{p}\Psi(x,t) = p\, e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \tag{2.11}$$

تلقي العلاقة الاخيرة ضوءا ساطعا على كيفية تعيين $\hat{p}$. ان اشتقاق التابع الاسي (2.10) بالنسبة الى x يعطي ($ip/\hbar$) ولكي نحصل على القيمة p كقيمة خاصة للمؤثر $\hat{p}$ يجب ان تكون عملية الاشتقاق مصحوبة بعملية ضرب بـ $(\hbar/i)$ ، وبناء على هذا نرى انه يجب ان نمثل $\hat{p}$ بالشكل :

$$\hat{p} = -i\hbar\, \partial/\partial x \tag{2.12}$$

باعتبار الشكل الصريح (2.1) لـ $\hat{p}$ والشكل الصريح (2.9) لـ x نرى ان العلاقة (2.8) محققة باخذ $\alpha = i$.

I . اعتمادا على المناقشة السابقة نسلم بان المتحولات القانونية المحققة لمعترضات بواصون (2.7) تُمثَّل في ميكانيك الكم بموثرات هرميتية تحقق العلاقات

التبادلية :

$$[\hat{x}_j , \hat{p}_k] = i\hbar \delta_{jk} \quad , [\hat{x}_j , \hat{x}_k] = 0 \; , \; [\hat{p}_j , \hat{p}_k] = 0 \, . \qquad (2.13)$$

فالتقابل اذن بين الميكانيك الكلاسيكي والميكانيك الكوانتي يتم بالتمثيل الرمزى التالي :

$$\{ \; , \; \} \longrightarrow i\hbar \, [\,\hat{}\, , \,\hat{}\,]$$

الذى تُقابَل فيه معترضة بواصون بمعترضة لي مضروبة بـ $i\hbar$.

II . الان كيف نمثل ملحوظا فيزيائيا $f(x_i , p_i)$ في ميكانيك الكم ؟

نسلم بان الموءثر المقابل للملحوظ الفيزيائي الكلاسيكي $f(x_i , p_i)$ نحصل عليه بان نستبدل بالمتحولات القانونية x_i و p_i . موءثرات $\hat{x}_i$ و $\hat{p}_i$ تحقق العلاقات التبادلية (2.13) ، شرط ان يكون الموءثر الناتج $f(\hat{x}_i , \hat{p}_i)$ هرميتيا .

نسوق بصدد هذه المسلمة الملاحظات التالية :

١) قد توجد عدة طرائق ننتقل وفقها من ملحوظ كلاسيكي الى الموءثر الكوانتي المقابل . وعلى سبيل المثال لا يختلف $x\,p_x$ كلاسيكيا عن $p_x\,x$. فهل يُمثَّل هذا الملحوظ بالموءثر $\hat{x}\,\hat{p}_x$ أم بالموءثر $\hat{p}_x\,\hat{x}$ ، ومن الواضح ان هذين الموءثرين غير متساويين . واكثر من هذا فكلا هذين الموءثرين غير هرميتي . عندما نجابه حالة كهذه يجب مناظرة الملحوظ الكلاسيكي ، فمثلا يكتب هذا الملحوظ بالشكل $\frac{1}{2}(x\,p_x + p_x\,x)$ ثم ننتقل الى الموءثر المقابل $\frac{1}{2}(\hat{x}\,\hat{p}_x + \hat{p}_x\,\hat{x})$ وهو هرميتي طبعا .

تمرين : كيف تمثل الملحوظ الكلاسيكي $x^2 p^2$ في ميكانيك الكم ؟ .

٢) اذا كانت $(q_1 , q_2 , \ldots , q_n)$ الاحداثيات المعممة لجملة وكانت $(p_1 , p_2 , \ldots , p_n)$ الدفوع المعممة المرافقة لها ، فعندئذ تمثل هذه الاحداثيات

والدفوع بموثرات تحقق العلاقات التبادلية (2.13) . اذا تم مثلا استخدام الاحداثيات القطبية كانت عندئذ الزاوية ϕ ومركبة العزم الحركي L_z متحوليـن مترافقين (يحققان معترضات بواصون) . ولذلك يمكن تمثيل هذين المتحوليـن الحركيين بموثرين يحققان العلاقات التبادلية (2.13) .

تمرين : استنتج الموثرين المقابلين لـ L_z و ϕ .

٣) اذا احتجنا في وصف جملة الى متحولات كوانتية ليس لها نظير كلاسيكي مثل العزم الحركي الذاتي (او السبين) ، فعندئذ لا تستطيع هذه المسلمة تقديم اية فائدة ، ونضطر آنئذ الى اللجوء الى طرائق اختبارية مستفيدين من الخصائص التناظرية للجملة ومن قوانين الانحفاظ لتعيين الموثر الهرميتي المقابل لملحوظ فيزيائي ليس له نظير كلاسيكي .

٤) يسمى التمثيل السابق للملحوظات الفيزيائية التمثيل الاحداثي او التمثيل x او تمثيل شرودنجر . نلفت الانتباه الى هذا التمثيل ليس وحيدا ، وبالحقيقة فكل تمثيل يحقق العلاقات التبادلية (2.13) مقبول . فمثلا يمكن ان نلجأ الى التمثيل :

$$\hat{p}\,\phi = p\,\phi \qquad (2.14)$$

$$\hat{x}\,\phi = i\hbar\,\partial\phi/\partial p \qquad (2.15)$$

ويسمى التمثيل الدفعي ، او التمثيل ـ p . وبالطبع فالتابع الموجي هنا يتبع الدفوع المعممة ، اى ان :

$$\phi = \phi\,(p_1, p_2, p_3)\,, \qquad (2.16)$$

وفراغ التوابع الموجية الذى ادخلناه في المسلمة الاولى ، هو مجموعة التوابع التربيعية المكاملة على فراغ الدفوع :

$$\iiint |\phi(p_1,p_2,p_3)|^2\,dp_1\,dp_2\,dp_3 < \infty \qquad (2.17)$$

المسلمة الرابعة : القياس الاعظمي - تحضير الجملة في حالة معلومة

ان قياسا فعليا لملحوظ فيزيائي $\hat{A}$ ينقل تابع حالة الجملة الى تابع حالة خاص للملحوظ الفيزيائي المدروس . وبالتحديد ينقل القياس تابع الحالة الى تابع حالة خاص مقابل للقيمة الخاصة الحاصلة نتيجة عملية قياس هذا الملحوظ .

لتكن حالة الجملة قبل عملية القياس معينة بالتابع الموجي ψ ، ولنفرض أن $\{\psi_n\}$ هي مجموعة التوابع الخاصة للملحوظ $\hat{A}$ وأن $\{\lambda_n\}$ طيفه او مجموعة قيمه الخاصة . اذا اجرينا عملية قياس للملحوظ الفيزيائي $\hat{A}$ نحصل على نتيجة تساوى احدى القيم الخاصة له ، ولنفرض انها القيمة الخاصة λ_n . تقول هذه المسلمة بأن حالة الجملة عقب عملية القياس مباشرة تتعين بالشعاع الخاص ψ_n المقابل للقيمة الخاصة λ_n . بناء على هذا تُعدّ عملية القياس طريقة لوضع جملة فيزيائية في حالة توصف بتابع موجي معلوم (نسميها احيانا حالة خاصة معلومة) اذن فعملية القياس تشكل طريقة لتحضير الجملة في حالة خاصة معلومة .

بحسب المسلمة الثانية يمكن نشر تابع حالة الجملة قبل عملية القياس ، وهو ψ بدلالة التوابع الخاصة $\{\psi_n\}$ للملحوظ الفيزيائي $\hat{A}$ ، وذلك بحسب العلاقة (2.6). فاذا كانت نتيجة عملية القياس λ_k تتلاشى كافة حدود المنشور (2.6) سوى الحد ψ_k ، وتمثل أثر عملية قياس نتيجتها λ_k بالشكل

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi_n | \psi \rangle \psi_n \xrightarrow[\lambda_k \text{ نتيجتها}]{\text{عملية قياس}} \psi_k \qquad (2.18)$$

ويعني هذا ان اثر العملية هو اسقاط تابع حالة الجملة قبل القياس ψ على التابع ψ_k

من أهم نتائج هذه المسلمة انه لا يمكن قياس جميع الملحوظات الفيزيائية معًا (في الوقت نفسه) . بالحقيقة واذا كان $\hat{A}$ و $\hat{B}$ ملحوظين فيزيائيين متعلقين بجملة ما، وكانت الاشعة والقيم الخاصة الخاصة لـ $\hat{A}$ معطاة كما سبق ، وكانت اشعة $\hat{B}$

وقيمه الخاصة على الترتيب $\{\phi_n\}$ و μ_n ، واذا كانت حالة الجملة قبل القياس المتواقت ل $\hat{A}$ و $\hat{B}$ ممثلة بالتابع ψ ، واذا فرضنا ان حصيلة هذا القياس المتواقت هي (λ_k و μ_i) حيث λ_k و μ_i قيمتي $\hat{A}$ و $\hat{B}$ على الترتيب كنتيجة لعملية القياس، وجدنا ان اثر عملية قياس $\hat{A}$ على الجملة يتمثل بالعلاقة (2.18) وان اثر عملية قياس B يتمثل بالعلاقة

$$\phi = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi_n | \phi \rangle \psi_n \longrightarrow \phi_i \qquad (2.19)$$

وتدل (2.18) و (2.19) على ان هذا القياس المتواقت غير ممكن مالم يكن تابع الحالة ψ_k الذى تنتقل اليه الجملة بعملية قياس $\hat{A}$ وهو تابع خاص ل $\hat{A}$ ، هو نفسه تابع الحالة ϕ_k الذى تنتقل اليه الجملة بعملية قياس $\hat{B}$ ، وهو تابع خاص ل $\hat{B}$. بعبارة ثانية يجب ان يكون للملحوظين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ اللذين نريد قياسهما معا المجموعة نفسها من التوابع الخاصة ، أي $\{\psi_n\} \equiv \{\phi_n\}$. ونحن نعلم أن الشرط الاخير محقق اذا وفقط اذا كان الملحوظان $\hat{A}$ و $\hat{B}$ متآلفين (أى كان الموثران الممثلان لهما تبديليين $[\hat{A},\hat{B}] = 0$) .

يمكن القول اذن : ان الشرط اللازم الكافي لكي يمكن اجراء قياس آني على جملة ما ، لملحوظين او اكثر ، هو ان تكون الموثرات المقابلة تبديلية . يمكن مثلا قياس y و z معا، او y و p_z معاً ، ولكن لا يمكن قياس y و p_y معا .

من أجل جملة ما توجد دوما مجموعة عظمى من الملحوظات المتآلفة المتعلقة بها، هذا ويمكننا ان نجرى على أية جملة مجموعة محدودة من القياسات المتواقتة. اذ يمكن مثلا اجراء قياس متواقت لاحداثيات جسيم او لمركبات دفعه ، ولذلك فان احداثيات جسيم (وباهمال السبين) هي مجموعة عظمى من الملحوظات المتآلفة المستقلة . يمكن ان نحصل على قيم دقيقة (او قاطعة) للاحداثيات وللطاقة الكامنة ايضا ، الا ان الطاقة الكامنة ليست مستقلة تابعياً عن الاحداثيات فهي تابع فيها. كذلك تؤلف مركبات الدفع مجموعة عظمى متآلفة مستقلة ولذلك تكون الملحوظات التي

تقبل القياس الآني معها ، أى تأخذ قيماً قاطعة ، توابع في هذه المركبات (مثل الطاقة الحركية) . يطلق اسم مجموعة تامة من الملحوظات الفيزيائية على مجموعة عظمى من الملحوظات الفيزيائية المتآلفة والمستقلة تابعيا عن بعضها ، ويسمى القياس الفعلي لهذه المجموعة التامة " قياسا اعظميا للجملة" وهو يوءدى الى معرفة القيم الخاصة لهذه الملحوظات في عمليات قياسات متواقتة لها جميعا ، ونتائج القياسات المتواقتة لهذه الملحوظات المتآلفة تكون قاطعة ولا تقبل الشك . يزودنا قياس اعظمي باكبر قدر من المعلومات يمكننا ان نعرفها عن الجملة المكممة .

تتهيأ الجملة عقب قياس اعظمي يجرى عليها في حالة خاصة مشتركة لمحلوظات مجموعة تامة كافة ، وتدعى هذه الحالة حالة خالصة .

سوف نرى فيما بعد ان المجموعة $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ حيث $\hat{H}$ موءثر الطاقة و $\hat{L}^2$ مربع العزم الحركي و $\hat{L}_z$ مركبة العزم الحركي للجسيم على oz هي (باهمال السبين) مجموعة تامة من الملحوظات المتعلقة بذرة الهيدروجين فاذا كانت حصيلة القياس الاعظمي لذرة الهيدروجين هي (E_n, a_ℓ, b_m) تهيأت الذرة عقب القياس مباشرة في حالة معينة بالثلاثية (E_n, a_ℓ, b_m) . قد تتساوى عدة قيم لملحوظ فيزيائي اذ قد تكون عدة قيم من الشكل E_n متساوية ، ولكن لا يمكن أن تتساوى ثلاثيتان من النوع السابق الا اذا كانتا تصفان الحالة نفسها للجملة . اما طريقة تعيين الصيغة الرياضية لتابع الحالة كتابع من فراغ التوابع الموجية فتتم بحل المعادلات الخاصة

$$\begin{aligned} \hat{H}\,\psi_{n\ell m} &= E_n\,\psi_{n\ell m} \\ \hat{L}^2\,\psi_{n\ell m} &= a_\ell\,\psi_{n\ell m} \\ \hat{L}_z\,\psi_{n\ell m} &= b_m\,\psi_{n\ell m} \end{aligned} \tag{2.20}$$

وسنرى ان لتابع حالة الجملة بعد القياس الاعظمي الشكل

$$\psi_{n\ell m} = R_{n\ell}(r)\,\Theta_{\ell m}(\theta)\,\Phi_m(\phi) \tag{2.21}$$

حيث $R_{n\ell}$ و $\Theta_{\ell m}$ و Φ_m هي توابع معينة في r و θ و ϕ على الترتيب .

اذا اجرينا قياسا لبعض الملحوظات في مجموعة تامة فان الجملة تتهيأ في حالة معينة جزئيا وتسمى حالة مختلطة . وفي الحالة المختلطة لا تزال ثمة معلومات مجهولة عن الجملة وهي قيم الملحوظات المتبقية كما ان تابع الحالة يكون غير معين تماما . يؤدي مثلا قياس العزم الحركي $\hat{L}^2$ ومركبته $\hat{L}_z$ الى تحضير الجملة في حالة توصف بتابع من الشكل .

$$\Psi_{\ell m} = R(r)\,\Theta_{\ell m}(\theta)\,\Phi_m(\phi) \qquad (2.22)$$

حيث $\Theta_{\ell m}$ و Φ_m تابعان معينان في θ و ϕ على الترتيب ، ولكن R تابع مجهول تماما . يتعين التابعان $\Theta_{\ell m}$ و Φ_m بقيمتي $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ الناتجتين ولكن قيمة الطاقة لا تزال مجهولة وكذلك ايضا شكل التابع $R(r)$.

تدل الملاحظات الاخيرة على أننا كنا قد بسطنا الى حد كبير طريقة تحضير الجملة في حالة معلومة لأننا ركزنا اهتمامنا على ملحوظ فيزيائي واحد واهملنا الملحوظات الاخرى . ولقد اصبحنا نعلم الآن ان التعيين الكامل لحالة جملة في لحظة ما ، يتطلب قياس القيم الخاصة لجميع الملحوظات المؤلفة لمجموعة تامة . ومتى تم هذا القياس الاعظمي ، فانا نستعمل الشعاع الخاص المشترك لهذه الملحوظات المتآلفة لتعيين حالة الجملة . وهذا الشعاع الخاص المشترك هو الشعاع المقصود من قبل والذى ينتقل اليه تابع الحالة بفعل القياس الاعظمي للجملة ، ولذلك فهو تابع الحالة الجديد . يمكن ان ندل على شعاع الحالة الخاص الناتج بواسطة القيم الخاصة التي تم الحصول عليها في القياس الاعظمي. لنفرض مثلا ان $\{A_1, A_2, \dots, A_n\}$ مجموعة تامة من الملحوظات متعلقة بجملة ما وان القيم الخاصة للملحوظ A_i هي $\{\omega_{i1}, \omega_{i2}, \omega_{i3}, \dots\}$، ولنفرض ان القيم الخاصة الناتجة لملحوظات المجموعة التامة في عملية قياس اعظمي للجملة هي $\{\omega_{1k_1}, \omega_{2k_2}, \dots, \omega_{nk_n}\}$، فعندئذ نرمز لتابع حالة الجملة بالرمز

$$\Psi = \Psi_{k_1 k_2 \dots k_n} \qquad (2.23)$$

ويكون لدينا

$$A_1\Psi = \omega_{1k_1}\Psi$$
$$A_2\Psi = \omega_{2k_2}\Psi \qquad (2.24)$$
$$\vdots \qquad \vdots$$
$$A_n\Psi = \omega_{nk_n}\Psi$$

وبما ان الاشعة الخاصة للموءثرات الهرميتية (التي مثلنا بها الملحوظات الفيزيائية) توءلف جملة كاملة مستنمدة ، لذلك فان تابعي حالة خاصين للجملة يكونان متعامدين اذا اختلف دليل واحد بينهما .

$$\langle \Psi_{k_1k_2\dots k_n} | \Psi_{k'_1k'_2\dots k'_n} \rangle = \delta_{k_1k'_1}\delta_{k_2k'_2}\dots\delta_{k_nk'_n} \qquad (2.25)$$

وكذلك يمكن نشر تابع حالة كيفي ϕ للجملة بدلالة توابع الحالات الخاصة لمجموعة الملحوظات التامة

$$\phi = \sum \varphi_{k_1k_2\dots k_n}\Psi_{k_1k_2\dots k_n} \qquad (2.26)$$

حيث يمتد المجموع السابق على جميع القيم الممكنة للأدلة k_1 و k_2 و . . . و k_n .

التمثيل المصفوفي بدلالة الاشعة الخاصة لمجموعة ملحوظات تامة :

يمكن ترتيب الاشعة الخاصة لمجموعة الملحوظات التامة $\{A_1, A_2, \dots, A_n\}$ بالطريقة التي نختارها ، واذا اقتصرنا من أجل التبسيط على مجموعة تامة موءلفة من ثلاثة ملحوظات $\{H, L^2, \hat{L}_z\}$ وفرضنا مثلا أن الادلة تأخذ القيم التالية :

$$k_1 = n = 1, 2, 3, \dots$$
$$k_2 = \ell = 0, 1, 2, \dots, k_1 - 1 \qquad (2.27)$$
$$k_z = m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm k_2$$

امكن ترتيب الاشعة الخاصة المقابلة بالشكل الاختياري التالي :

$$\begin{array}{lllllllll} \psi_{100} \\ \psi_{211} & \psi_{210} & \psi_{21-1} & \psi_{200} \\ \psi_{322} & \psi_{321} & \psi_{320} & \psi_{32-1} & \psi_{32-2} & \psi_{311} & \psi_{310} & \psi_{31-1} & \psi_{300} \end{array} \qquad (2.28)$$

وباتباع هذا الترتيب يمثل تابع حالة كيفي ψ بعمود غير منته من الاسفل، وبشكل خاص يمثل $\psi_{n\ell m}$ بعمود ينقسم الى اعمدة جزئية تنقسم بدورها الى خانات تحتوي على عدد من العناصر ، وجميع عناصر هذا العمود معدومة سوى عنصر وحيد يساوي الواحد ، ونوضح هذا بمثال . يمثل ψ_{21-1} بالعمود التالي :

$$\begin{array}{|c|ll} 0 & n=0 & \ell=0,\ m=0 \\ \hline 0 & & \\ 0 & n=1 & \ell=1,\ m=\begin{cases}1\\0\\-1\end{cases} \\ 0 & & \\ \cdots & & \\ 0 & & \ell=0,\ m=0 \\ \hline 0 & & \\ 0 & & \\ 0 & & \ell=2,\ m=\begin{cases}2\\1\\0\\-1\\-2\end{cases} \\ 0 & & \\ 0 & n=2 & \\ \cdots & & \\ 0 & & \\ 0 & & \ell=1,\ m=\begin{cases}1\\0\\-1\end{cases} \\ 1 & & \\ \cdots & & \\ 0 & & \ell=0,\ m=0 \\ \hline 0 & & \\ \vdots & & \end{array} \qquad (2.29)$$

وتمثل ملحوظات المجموعة التامة بمصفوفات قطرية عناصر قطرها هي القيم الخاصة المقابلة، ومثلا تكون المصفوفة الممثلة لـ $\hat{H}$:

$$(2.30)\quad [\hat{H}] = \left[\begin{array}{c|ccc|c|c} E_1 & 0 & & & 0 & 0 \\ \hline 0 & E_2 & & 0 & 0 & 0 \\ & & E_2 & & & \\ & 0 & & E_2 & & \\ \hline 0 & & 0 & & E_2 & 0 \\ \hline 0 & & 0 & & 0 & E_3 \end{array}\right]$$

والمصفوفة الممثلة ل $\hat{L}^2$ هي

$$(2.31)\quad [\hat{L}^2] = \left(\begin{array}{c|ccc|c|c} a_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & a_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & a_0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_2 \end{array}\right)$$

والمصفوفة الممثلة ل $\hat{L}_z$ هي

$$(2.32)\quad [\hat{L}_z] = \left(\begin{array}{c|ccc|c|c} b_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & b_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_{-1} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & b_0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_2 \end{array}\right)$$

المسلمة الخامسة : صف القياسات المحتمة النتيجة ـ الحالات المستقرة :

اذا كان تابع الحالة للجملة في لحظة القياس احد التوابع الخاصة ψ_n للملحوظ الفيزيائي $\hat{A}$ الذي يقاس ، فان نتيجة القياس هي حتما القيمة الخاصة المقابلة λ_n .

تؤدي هذه المسلمة وسابقتها الى النتيجة: اذا اعدنا تجربة قياس ملحوظ منا حالا، فاننا سنحصل على القيمة نفسها التي حصلنا عليها في التجربة السابقة ، طالما ان التجربة الأولى تحضر الجملة في تابع خاص ل $\hat{A}$ مقابل للقيمة الخاصة الناتجة في التجربة ، وحسب المسلمة الراهنة يعطي القياس الآخر القيمة السابقة نفسها ، وذلك لأن الجملة اصبحت في حالة توصف بتابع خاص ل $\hat{A}$ وهو التابع الذى حددته التجربة السابقة .

من الواضح ان هذه المسلمة ضرورية لكي يكون لعملية القياس معنى .تدل هذه

المسلمة ان النتائج المحتمة لعملية قياس لملحوظ فيزيائي يتعلق بجملة تحدث فقط لما تكون الجملة محضرة في حالة تتصف بأنها تابع حالة خاص للملحوظ الذي نقيسه..

بناء على هذا نرى أنه برغم ان عملية القياس لا تقود بشكل عام الى قيمة حتمية للملحوظ المعتبر ، الا ان ثمة صف من عمليات القياس تكون فيها نتيجة قياس ملحوظ فيزيائي ما موكدة ونعلمها سلفا وهي تلك التي تقيس قيمة ملحوظ ما عند ما تكون الجملة في حالة خاصة له .

تسمى الحالات التي يقود فيها قياس الطاقة الى قيمة حتمية حالات مستقرة. فالحالات المستقرة لجملة هي الحالات التي تكون التوابع الموجية التي تصفها توابع خاصة لموثر الطاقة .

المسلمة السادسة : القيمة المتوقعة لملحوظ فيزيائي :

عند ما يكون تابع الحالة للجملة مغايراً لكل التوابع الخاصة للملحوظ المدروس $\hat{A}$ ، فان نتيجة القياس لا يمكن التنبوء بها ، ولا تقود بالضرورة الى قيمة معينة. بالحقيقة يمكن ان تنتج اية قيمة للملحوظ لكن باحتمالات مختلفة . تفيد المسلمة الراهنة ان : القيمة المتوقعة (الوسطى) لنتيجة قياس ملحوظ $\hat{A}$ لما تكون الجملة في الحالة ψ هي :

$$\langle A\rangle_{\psi} = \langle \psi | \hat{A} \psi\rangle \tag{2.33}$$

واذا كان ψ غير مستنظم فيجب قسمة الطرف الثاني على مربع نظيم ψ :

$$\langle A\rangle_{\psi} = \frac{\langle \psi | A \psi\rangle}{\langle \psi | \psi\rangle} \tag{2.34}$$

من الواضح ان القيمة المتوقعة $\langle A \rangle$ عدد حقيقي يتعلق بالموثر $\hat{A}$ وبتابع الحالة ψ ، وهي تختلف عموما عن القيم الخاصة λ_n للملحوظ A . لكن

اذا حدث ان كان تابع الحالة للجملة احد التوابع الخاصة ψ_n للملحوظ $\hat{A}$، فـان القيمة المتوقعة تساوى حتما القيمة الخاصة المقابلة λ_n :

$$\langle A\rangle_{\psi_n} = \langle \psi_n | \hat{A}\psi_n \rangle = \langle \psi_n | \lambda_n \psi_n \rangle = \lambda_n \qquad (2.35)$$

وهـي نتيجة تتفق والمسلمة الخامسة . فاذا كانت الجملة في الحالة الخاصـة ψ_n، فان نتائج التجارب المتكررة في قياس $\hat{A}$ هي دائما القيمة الخاصة λ_n ومتوسطها يساويها وضوحا .

تؤلف هذه المسلمة حلقة الوصل بين النظرية والتجربة . اما من ناحيـة تجريبيـة فيمكن الحصول على القيمة المتوقعة لملحوظ ما متعلق بجملة فيزيائية مـا ، باجراء عدد كبير من القياسات على الجملة بعد تحضيرها كل مرة في الحالة ψ نفسها، او يمكن البدء بعدد كبير من الجمل المتطابقة (نسخ متطابقة عن بعضها بعضـا) وتحضير كل منها في الحالة ψ نفسها ثم اجراء القياس على كل منها ، واخيرا اخذ القيمة الوسطى للنتائج الحاصلة . يجب ان كانت النظرية صحيحة ، ان تكون هـذه القيمة الوسطى ذات المنشأ التجريبي مساوية للقيمة المتوقعة نظريا بالعلاقة (2.33).

امامنا الآن السؤال التالي : لنفرض ان جملة في حالة معروفة ψ . ما هـو احتمال الحصول على القيمة الخاصة λ_n لدى اجراء تجربة واحدة لتعيين قيمـة الملحوظ $\hat{A}$ ؟

للاجابة عن هذا السؤال ، ننشر تابع الحالة ψ بدلالة التوابع الخاصـة للملحوظ $\hat{A}$

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi_n | \psi \rangle \psi_n \qquad (2.36)$$

ثم نعوض في (2.33) للحصول على القيمة المتوقعة

$$\langle A\rangle_{\psi} = \langle \sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m | A \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n \rangle \qquad (2.37)$$

$$= \langle \sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m | \sum_{n=1}^{\infty} c_n A \psi_n \rangle$$

$$= \sum_{m,n}^{\infty} c_m^* c_n \langle \psi_m | \hat{A} \psi_n \rangle$$

$$= \sum_{m,n}^{\infty} c_m^* c_n \langle \psi_m | \lambda_n \psi_n \rangle$$

$$= \sum_{m,n}^{\infty} c_m^* c_n \lambda_n \delta_{mn}$$

$$= \sum_{n}^{\infty} \lambda_n |c_n|^2$$

بامعان النظر في الصيغة (2.37) نرى ان امامنا عملية قياس لملحوظ فيزيائي $\hat{A}$ تقود الى احدى النتائج λ_1 او λ_2 او ... ، فاذا رمزنا لاحتمال الحصول على هذه النتائج بالرموز $P(\lambda_1)$ و $P(\lambda_2)$ و ... كانت القيمة المتوقعة لـ $\hat{A}$ بحسب حساب الاحتمال (القيمة المتوقعة لمتحول عشوائي)

$$\langle A \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n P(\lambda_n) \qquad (2.38)$$

بمقارنة هذه الصيغة مع سابقتها نجد ان احتمال الحصول على القيمة λ_n للملحوظ $\hat{A}$ عند ما يكون تابع حالة الجملة ψ يعطى بالعلاقة

$$P_\psi(\lambda_n) = |c_n|^2 = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2 \qquad (2.39)$$

اى بمربع القيمة المطلقة لمركبة ψ على ψ_n . يعود هذا التفسير الى ماكس بورن (1926) .

بحسب المسلمة الرابعة نحصل على القيمة الخاصة λ_n لملحوظ $\hat{A}$ اذا انتقلت الجملة اثر عملية القياس من الحالة المعينة بـ ψ الى الحالة الخاصة المعينة بـ ψ_n. واستنادا الى هذا يكون احتمال الحصول على القيمة الخاصة λ_n للملحوظ $\hat{A}$ عند ما تكون حالة الجملة معينة بالتابع ψ وهو $P_\psi(\lambda_n)$ مساويا الى احتمال انتقال الجملة من الحالة ψ الى الحالة الخاصة ψ_n ، أى الى $P(\psi \to \psi_n)$ ، وبناء

على هذا نكتب :

$$P(\psi \rightarrow \psi_n) = P_\psi(\lambda_n) = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2 \tag{2.40}$$

وتدل هذه العلاقة على أنه اذا كانت الجملة قبل القياس في الحالة ψ_n فان احتمال الحصول على λ_n مؤكد ، اما اذا كانت الجملة قبل القياس في حالة خاصة $\psi_m \neq \psi_n$ كان احتمال الحصول على λ_n معدوم .

كيلا يبقى مأخذ على التفسير الاحتمالي للأمثال $|\langle \psi_n | \psi \rangle|^2$ يجب أن نتأكد من ان مجموع احتمالات الحصول على أى من القيم الخاصة الممكنة يساوى الواحد، ولذلك نريد ان يكون $\sum_n |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2 = 1$. لكن هذا الطلب سهل التحقيق اذا اتفقنا على تمثيل جميع حالات الجملة بتوابع مستنظمة :

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \langle \sum_n \langle \psi_n | \psi \rangle \psi_n | \sum_m \langle \psi_m | \psi \rangle \psi_m \rangle \tag{2.41}$$

$$= \sum_{n,m} \langle \psi_n | \psi \rangle^* \langle \psi_m | \psi \rangle \langle \psi_n | \psi_m \rangle$$

$$= \sum_{n,m} \langle \psi_n | \psi \rangle^* \langle \psi_m | \psi \rangle \, \delta_{nm}$$

$$= \sum_n |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2$$

تمرين : برهن ان عندما يكون ψ غير مستنظم فان احتمال الحصول على λ_n هو

$$P_\psi(\lambda_n) = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2 / \|\psi\|^2 \tag{2.42}$$

المسلمة السابعة : معادلات الحركة :

لقد رأينا في المسلمات السابقة كيف نبني المؤثرات الممثلة لملحوظات فيزيائية وكيف تمثل حالة جملة ، وكيف نجد القيم الخاصة لملحوظ فيزيائي وقيمته

المتوقعة عند ما تكون الجملة في حالة معينة . لنفرض أنه في لحظة t كان شعاع الحالة لجملة فيزيائية $\psi_0(r,t)=\psi(r,0)$ وكانت خواصها الفيزيائية ممثلة بالمجموعة التامة من الملحوظات $F_{i0}(\hat{q}_i,\hat{p}_i)$. يمكن الآن ان نحصل على القيم المتوقعة لكل من هذه الملحوظات من العلاقة

$$\langle F_{i0}\rangle = \langle \psi_0 | F_{i0} | \psi_0 \rangle \tag{2.43}$$

وهي تتفق مع التجربة . السؤال المطروح الآن هو : ماذا يصبح شعاع الحالة ψ والملحوظات F_i في لحظة لاحقة $t>0$ ؟

في الميكانيك الكلاسيكي يعطى التطور الزمني لـ F بمعادلة حركته

$$\frac{dF}{dt} = \{F,H\} + \frac{\partial F}{\partial t} \tag{2.44}$$

واذا كان F لا يتبع الزمن صراحة زال الحد الثاني في الطرف الايمن . لكن كيف يوصف تغير F في ميكانيك الكم ؟

في ميكانيك الكم يمكن ان نلجأ الى احدى الصورتين التاليتين في وصف جملة كوانتية مع الزمن .

صورة شرودنجر :

نسلم بأن الملحوظات الفيزيائية التي لا تتعلق بالزمن صراحة تمثل بموئثرات هرميتية مستقلة عن الزمن ، على حين تمثل الحالة بتابع موجي ψ يتعلق بالزمن ويتغير تابع الحالة $\psi(r,t)$ تبعا للزمن بحسب المعادلة :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \tag{2.45}$$

صورة هايزنبرغ :

نسلم بأن الملحوظات الفيزيائية وان كانت لا تتبع الزمن صراحة تمثل بموئثرات هرميتية متعلقة بالزمن بينما تمثل الحالة بتابع مستقل عن الزمن . اما تغير الملحوظات

الفيزيائية $\hat{F}_i$ فيعطى بمعادلة هايزنبرغ في الحركة

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[F,H] + \frac{\partial F}{\partial t} \qquad (2.46)$$

في الحالة التي لا تتبع فيها الملحوظات الزمن صراحة تؤول معادلة هايزنبرغ الى :

$$i\hbar \frac{d\hat{F}}{dt} = [\hat{F},\hat{H}] \qquad (2.47)$$

ينتج بشكل خاص عن هذه المعادلة ان :

$$\frac{d}{dt}\hat{q}_i = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_i} \quad , \quad \frac{d}{dt}\hat{p}_i = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}_i} \; ; \qquad (2.48)$$

وهي مطابقة في شكلها لمعادلات هاميلتون في الميكانيك الكلاسيكي .

ان الصورتين متكافئتان بمعنى انهما تقودان فيزيائيا الى الخواص نفسها للجملة ، ومن ناحية رياضية يعني تكافؤ الصورتين ان :

١- لكل ملحوظ القيم الخاصة نفسها في الصورتين .

٢- القيم المتوقعة لأي ملحوظ من أجل كل حالة للجملة هي نفسها في الصورتين .

٣- كل معادلة محققة في احدى الصورتين يناظرها بمعادلة وحيدة محققة في الصورة الاخرى .

تدل المعادلة (2.47) على أنه اذا كان F مستقلا صراحة عن الزمن فانه يكون ثابتا للحركة اذا كان مبادلاً مع موئثر هاميلتون $\hat{H}$ معدوماً. بعبارة ثانية تبقى قيمة $\hat{F}$ المقيسة في لحظة ما ثابتة بمرور الزمن .

§3. جملة عدة جسيمات

لنعتبر جملة مؤلفة من جسيمين يتبادلان التأثير فيما بينهما . في جملة كهذه يكون مؤثر هاميلتون

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 + V_1(\underline{r}_1) - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V_2(\underline{r}_2) + V_{12}(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \qquad (3.1)$$

يحوى ∇_1 المشتقات الجزئية لاحداثيات الجسيم الأول ويحوى ∇_2 المشتقات الجزئية للاحداثيات الجسيم الثاني . يتألف هاميلتون في الجملة من (a) الطاقة الحركية للجسيمين ، (b) الطاقتين الكامنتين $V_1(\underline{r}_1)$ و $V_2(\underline{r}_2)$ الناتجتين من تفاعل كلا الجسيمين والحقل الخارجي ، (c) طاقة تفاعل الجسيمين وبعضيهما بعضا $V_{12}(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$.

تتعين حالة الجملة بتابع يتعلق باحداثيات الجسيمين معا

$$\psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, t) \qquad (3.2)$$

وتعمم الآن جميع العلاقات والمفاهيم التي تم الحديث عنها في المسلمات السابقة الى هذه الجملة ، فتعطى معادلة شرودنجر كالمعتاد ب

$$\hat{H}\psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, t) \qquad (3.3)$$

ويأخذ الجداء الداخلي لتابعين في احداثيات الجسيمين معا ψ و φ الشكل

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \iint \psi^* \varphi \, d\tau_1 \, d\tau_2 \qquad (3.4)$$

وتسير المحاكمات كافة كما كانت عليه من أجل جسيم وحيد .

يجب ان نلاحظ هنا ان تعيين حالة الجملة لا يعين بالضرورة حالة كل جسيم فيها . اذ ان وجود التفاعل المتبادل يجعل حالة الجسيم الأول تتأثر بحالة

الجسيم الثاني ولا يمكن وصفها اطلاقا بتابع يتعلق باحداثيات الجسيم الأول فقط (فلو حدث ذلك لكان التفاعل بين الجسيم معدوما) . وتنبطق افادة مماثلة على الجسيم الثاني . نستنتج اذن انه يمكننا في هذه الحالة الحديث عن التابع الموجي للجملة ككل وليس ابدا عن التابعين الموجيين لجزأيها .

لو فرضنا الآن ان حالة الجملة معينة بصورة تتعين وفقها حالة كل جزء منها تماما ، فعندئذ يمكن القول ان الكثافة الاحتمالية لاحداثيات الجسيم الأول مستقلة عن الكثافة الاحتمالية لاحداثيات الجسيم الثاني ، ويؤدي هذا الى أن الكثافة الاحتمالية للجملة ككل تساوي جداء تابعي كثافة الاحتمال لجزأيها

$$|\Psi(\underline{r}_1,\underline{r}_2,t)|^2 = |\Psi_1(\underline{r}_1,t)|^2\,|\Psi_2(\underline{r}_2,t)|^2 \tag{3.6}$$

وتدل هذه العلاقة على أنه يمكن التعبير عن التابع الموجي للجملة على صورة جداء للتابعين الموجيين لجزأى الجملة

$$\Psi(\underline{r}_1,\underline{r}_2,t) = \Psi_1(\underline{r}_1,t)\,\Psi(\underline{r}_2,t) \tag{3.7}$$

في هذه الحالة يكون التفاعل بين الجزأين معدوما $V_{12}(\underline{r}_1,\underline{r}_2)=0$ ، ويكتب من ثم موءثر هاميلتون للجملة بالشكل التالي :

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \tag{3.8}$$

حيث يرمز $\hat{H}_1$ و $\hat{H}_2$ على الترتيب الى موءثري هاميلتون للجزء الأول والثاني منفرداً، من الواضح ان $\hat{H}_1$ و $\hat{H}_2$ يتآلفان لانهما يتعلقان بمتحولات مختلفة .

$$[\hat{H}_1 , \hat{H}_2] = 0 \tag{3.9}$$

ويدل هذا على انه يمكن اختيار توابع خاصة مشتركة لهذين الموءثرين من الشكل

$$\Psi_{nm}(\underline{r}_1,\underline{r}_2,t) = \alpha_n(\underline{r}_1,t)\,\beta_m(\underline{r}_2,t) \qquad (n,m=1,2,3,\dots) \tag{3.10}$$

حيث يكون

$$H_1 \alpha_n = E_n \alpha_n \;\&\; H_1 \Psi_{nm} = E_n \Psi_{nm} \tag{3.11}$$

$$H_2 \beta_m = E_m \beta_m \;\&\; H_2 \Psi_{nm} = E_m \Psi_{nm} \tag{3.12}$$

$$H \Psi_{nm}(\underline{r}_1, \underline{r}_2, t) = (E_n + E_m)\, \Psi_{nm}(\underline{r}_1, \underline{r}_2, t) \tag{3.13}$$

تؤكد المعادلات السابقة من جديد على أن قيم $\hat{H}_1$ و $\hat{H}_2$ مستقلة تماما عن بعضها ، ويدل الشكل (3.7) للتابع الموجي على أن القيمة المتوقعة لأية كمية تتعلق بالجسيم 1 مستقلة عن حالة الجسيم 2 ، والعكس بالعكس . فاذا كان $\hat{A}_1$ ملحوظا فيزيائيا متعلقا بالجسيم 1 ، كانت القيمة المتوقعة ل $\hat{A}_1$ عندما تكون الجملة في حالة كيفية Ψ

$$\langle A_1 \rangle_\Psi = \langle \Psi | A_1 \Psi \rangle = \langle \Psi_1 \Psi_2 | A_1 \Psi_1 \Psi_2 \rangle \tag{3.14}$$

$$= \langle \Psi_2 | \Psi_2 \rangle \langle \Psi_1 | A_1 \Psi_1 \rangle = \langle A_1 \rangle_{\Psi_1}$$

من أجل نموذج كهذه الجملة نجد امامنا اختيارين ، فاما ان نعتبر الجملة جملة جسيمين مستقلين ، واما ان نعتبرها جملتين منفصليتين تتألف كل منهما من جسيم واحد .

نلفت الانتباه هنا الى ان الجداء الداخلي لتابعي حالة للجملة $\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$ و $\Phi(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$ يأخذ بسبب العلاقة (3.7) الشكل

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \langle \Psi_1(\underline{r}_1) \Psi_2(\underline{r}_2) | \Phi_1(\underline{r}_1)\, \Phi_2(\underline{r}_2) \rangle \tag{3.15}$$

$$= \langle \Psi_1 | \Phi_1 \rangle \langle \Psi_2 | \Phi_2 \rangle .$$

يمكن تعميم جميع الملاحظات والنتائج السابقة من أجل جملة مؤلفة من N جسيما .

* ملاحظة حول العلاقة بين تمثيل الجملة وتمثيل اجزائها :

سوف نجيب الآن على السوءال التالي : اذا نظرنا الى جملة جسيمين لا يتبادلان التأثير على أنهما جملتين منفصلتين . واذا كان σ_1 ملحوظا يتعلق بالجسيم الاول فانه يمثل بدلالة $\{\alpha_n\}$ بمصفوفة عناصرها

$$\alpha_{ik} = \langle \alpha_i | \sigma_1 | \alpha_k \rangle \tag{3.17}$$

واذا نظرنا الى σ_1 على أنه ملحوظ يتعلق بالجملة ككل مثلناه بدلالة الجملة الكاملة $\{\psi_{nm}\}$ بمصفوفة عناصرها

$$a_{ijkl} = \langle \psi_{ij} | \sigma_1 | \psi_{kl} \rangle \tag{3.18}$$

كذلك اذا كان σ_2 ملحوظا يتعلق بالجسيم الثاني فانه يمثل بمصفوفة عناصرها

$$b_{jl} = \langle \beta_j | \sigma_2 | \beta_l \rangle \tag{3.19}$$

واذا نظرنا اليه على أنه ملحوظ يخص الجسمة كلها مثلناه بمصفوفة عناصرها

$$b_{ijkl} = \langle \psi_{ij} | \sigma_2 | \psi_{kl} \rangle . \tag{3.20}$$

السوءال المطروح هو : ما علاقة المصفوفتين $[a_{ik}]$ و $[b_{jl}]$ بالمصفوفتين $[a_{ijkl}]$ و $[b_{ijkl}]$ ؟ .

للاجابة عن هذا السوءال نبسط المسألة الى ابعد حد ممكن (التعميم ليس صعبا) فنفرض ان $\{\alpha_1 , \alpha_2\}$ هي جملة كاملة من الاشعة تتعلق بالجسيم الاول ، كأن تكون مثلا الاشعة الخاصة لملحوظ فيزيائي $\hat{\sigma}_{z_1}$ يوءلف بمفرده مجموعة كاملة من الملحوظات تتعلق بالجسيم الاول ، حيث يكون مثلا

$$\hat{\sigma}_{z_1} \alpha_1 = 1\, \alpha_1 \qquad \hat{\sigma}_{z_2} \alpha_2 = -1\, \alpha_2 \tag{3.21}$$

ونفترض ان $\{\beta_1, \beta_2\}$ جملة كاملة من الاشعة تتعلق بالجسيم الثاني ، كأن تكون الاشعة الخاصة لملحوظ فيزيائي $\hat{\sigma}_{z2}$ يوءلف بمفرده مجموعة كاملة من الملحوظات تتعلق بالجسيم الثاني ، حيث نفترض مثلا ان :

$$\hat{\sigma}_{z2}\,\beta_1 = 1\,\beta_1 \quad , \quad \hat{\sigma}_{z2}\,\beta_2 = -1\cdot\beta_2 \tag{3.22}$$

حيث انه يمكن ان ننشر تابع حالة كيفية للجسيم الاول (الثاني) بدلالة الجملة الكاملة $\{\alpha_1, \alpha_2\}$ ($\{\beta_1, \beta_2\}$) ، اذن يمثل تابع حالة كيفية للجسيم الاول (الثاني) بعمود (2×1). اما الملحوظات الفيزيائية المتعلقة بالجسيم الاول (الثاني) فتمثل بدلالة الجملة الكاملة $\{\alpha_1, \alpha_2\}$ ($\{\beta_1, \beta_2\}$) بمصفوفة (2×2) . ومن (3.17) و (3.19) نجد أن المصفوفة الممثلة لـ σ_1 (σ_2) معتبرا كملحوظ يتعلق بالجسيم الأول (الثاني) هي :

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \qquad \left(\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} \right) \tag{3.23}$$

لنعد فننظر الى الجملة الآن كشيء متكامل يوءلف الجسيمان جزأيها . تتعين الحالات الخاصة للجملة الآن بالقيم الخاصة الاربعة التي يأخذها σ_{z1} و σ_{z2} المتعلقين بجزأيها .

$$\begin{aligned}
\sigma_{z1} = 1 \,,\ \sigma_{z2} = 1 \quad &\Rightarrow \quad \Psi_{11} = \alpha_1 \beta_1 \\
\sigma_{z1} = 1 \,,\ \sigma_{z2} = -1 \quad &\Rightarrow \quad \Psi_{12} = \alpha_1 \beta_2 \\
\sigma_{z1} = -1 \,,\ \sigma_{z2} = 1 \quad &\Rightarrow \quad \Psi_{21} = \alpha_2 \beta_1 \\
\sigma_{z1} = -1 \,,\ \sigma_{z2} = -1 \quad &\Rightarrow \quad \Psi_{22} = \alpha_2 \beta_2
\end{aligned} \tag{3.24}$$

وتمثل حالة كيفية للجملة بدلالة الجملة الكاملة $\{\Psi_{nm}\}$ بعمود ذي اربع مركبات ويمثل ملحوظ فيزيائي يتعلق بالجملة بمصفوفة (4×4) .

اذا نظرنا الى الملحوظ σ_1 المتعلق بالجسيم الاول على أنه ملحوظ يخص كل الجملة كانت المصفوفة الممثلة له بحسب (3.18) و (3.10)

$$a_{ijkl} = \langle \psi_{ij} | \sigma_1 | \psi_{kl} \rangle = \langle \alpha_i \beta_j | \sigma_1 | \alpha_k \beta_k \rangle \tag{3.25}$$

$$= \langle \alpha_i | \sigma_1 | \alpha_k \rangle \langle \beta_j | \beta_l \rangle = a_{ik} \delta_{jl}$$

وتكون المصفوفة الممثلة لـ σ_2 على اعتبار انه ملحوظ يخص الجملة الكاملة

$$b_{ijkl} = \langle \psi_{ij} | \sigma_2 | \psi_{kl} \rangle = \langle \alpha_i \beta_j | \sigma_2 | \alpha_k \beta_l \rangle \tag{3.26}$$

$$= \langle \alpha_i | \alpha_k \rangle \langle \beta_j | \sigma_2 | \beta_l \rangle = \delta_{ik} b_{jl}$$

وذلك بالاستفادة من (3.20) و (3.10) . وهكذا يكون

$$[A_{ijkl}] = \left[\begin{array}{cc|cc} a_{11,11} & a_{11,12} & a_{11,21} & a_{11,22} \\ a_{12,11} & a_{12,12} & a_{12,21} & a_{12,22} \\ \hline a_{21,11} & a_{21,12} & a_{21,21} & a_{21,22} \\ a_{22,11} & a_{22,12} & a_{22,21} & a_{22,22} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c} A_{11} & A_{12} \\ \hline A_{21} & A_{22} \end{array}\right] \tag{3.27}$$

يعين الدليلان i,k الحجرة A_{ik} التي نجد فيها العنصر a_{ijkl} ،ويعين الدليلان jl موضعه في تلك الحجرة . تبين المعادلة ان كل حجرة A_{ik} مصفوفة قطرية تساوى جميع عناصر قطرها a_{ik} . أى أن

$$[A_{ijkl}] = \left[\begin{array}{cc|cc} a_{11} & 0 & a_{12} & 0 \\ 0 & a_{11} & 0 & a_{12} \\ \hline a_{21} & 0 & a_{22} & 0 \\ 0 & a_{21} & 0 & a_{22} \end{array}\right] \tag{3.28}$$

بطريقة مشابهة نجد أن :

$$(3.29) \qquad [b_{ijkl}] = \left[\begin{array}{c|c} B_{11} & B_{12} \\ \hline B_{21} & B_{22} \end{array}\right]$$

تظهر المعادلة (3.26) أن $B_{ik} = 0$ اذا كان $i \neq k$ وان المصفوفتين الجزئيتين (الحجرتين) B_{11} و B_{22} تطابقان المصفوفة $[b_{jl}] = B$ التي تمثل σ_2 كملحوظ متعلق بالجسيم الثاني . وهكذا نجد

$$(3.30) \qquad [b_{ijkl}] = \left[\begin{array}{cc|cc} b_{11} & b_{12} & \multicolumn{2}{c}{0} \\ b_{21} & b_{22} & & \\ \hline & & b_{11} & b_{12} \\ \multicolumn{2}{c|}{0} & b_{21} & b_{22} \end{array}\right]$$

٤.٥ مبدأ هايزنبرغ في الشك :

اذا كان $\hat{A}$ و $\hat{B}$ ملحوظين غير متآلفين فلا يمكن قياسهما معا كما نعلم، بمعنى أنه لا يمكن الحصول على قيمتين موكدتين كنتيجة لتجربة القياس المتواقت لهما لكن بامكاننا أن نسأل السؤال التالي : لنفرض أنه وجدنا بالقياس أن قيمة الملحوظ $\hat{A}$ هي القيمة الخاصة α_i ، فما هو آنئذ احتمال أن نجد في تجربة قياس للملحوظ $\hat{B}$ القيمة الخاصة β_k • اذا كانت التوابع الخاصة لـ $\hat{A}$ هي f_i فان الحصول على القيمة α_i للملحوظ $\hat{A}$ يعني أن الجملة قد تهيأت في الحالة f_i . اذا رمزنا الى التابع الخاص المقابل للقيمة الخاصة β_k للملحوظ $\hat{B}$ بالرمز g_k ، يكون الاحتمال المطلوب

$$P = |\langle g_k | f_i \rangle|^2 \qquad (4.1)$$

وبالطبع نحصل على نفس القيمة اذا قسنا $\hat{B}$ اولا و $\hat{A}$ بعدها .

مادامت نتيجة القياس لملحوظين غير متآلفين تحصل باحتمال فقط (أى قيمة الاول α واحتمال أن قيمة الثاني تساوى β هي P المعطاة سابقا او العكس) اذن فعندما تكون الجملة في تابع حالة ما فانه يمكن تحديد قيمتي الملحوظين بارتياب او بشك له انتشار معين . يعبر عن هذا الارتياب بالتشتت المتعلق بالملحوظ (أو متوسط الانحراف التربيعي) ، وهو كما نذكر

$$\mathrm{Var}\,\hat{A} = (\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \qquad (4.2)$$

اذا كانت الجملة في حالة خاصة للملحوظ $\hat{A}$ مقابلة للقيمة الخاصة α فان

$$(\Delta \hat{A})^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 = \alpha^2 - \alpha^2 = 0$$

اذن من أجل كل حالة خاصة لـ $\hat{A}$ لدينا $\Delta \hat{A} = 0$. وهي نتيجة متوقعة ، لأنـــــه

عند ما تكون الجملة في خالة خاصة لملحوظ فان نتيجة قياس هذا الملحوظ معروفة ومؤكدة سلفا ولا تقبل الشك .

سنجد الآن علاقة بين انحرافي ملحوظين غير متآلفين . لنفرض أن

$$[\hat{A},\hat{B}] = i\hat{C} \qquad (4.3)$$

حيث ان $\hat{C}$ هرميتي . لدينا اذن في حالة ما Ψ

$$(\Delta A)^2 = \langle\Psi|(\hat{A}-\langle A\rangle)^2\Psi\rangle$$

$$(\Delta B)^2 = \langle\Psi|(B-\langle B\rangle)^2\Psi\rangle \qquad (4.4)$$

لكن $\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle$ و $\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle$ هرميتيان لأن $\hat{A}$ و $\hat{B}$ كذلك ، اذن

$$(\Delta A)^2 = \langle(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)\Psi|(\hat{A}-\langle A\rangle)\Psi\rangle$$

$$(\Delta B)^2 = \langle(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)\Psi|(B-\langle B\rangle)\Psi\rangle \qquad (4.5)$$

لنضع

$$\phi_1 = (A-\langle A\rangle)\Psi \quad , \quad \phi_2 = (B-\langle B\rangle)\Psi \qquad (4.6)$$

فنجد من (4.5) أن

$$\Delta\hat{A} = \|\phi_1\| \quad , \quad \Delta B = \|\phi_2\| \qquad (4.7)$$

وبحسب شوارتز يكون

$$\|\phi_1\|\,\|\phi_2\| \geqslant |\langle\phi_1|\phi_2\rangle| \qquad (4.8)$$

ومن ثم

$$\|\phi_1\|\,\|\phi_2\| \geqslant |Im\langle\phi_1|\phi_2\rangle|$$

$$= \left|\frac{1}{2i}(\langle\phi_1|\phi_2\rangle - \langle\phi_1|\phi_2\rangle^*)\right|$$

$$\Rightarrow \|\phi_1\|\,\|\phi_2\| \geqslant \frac{1}{2}|\langle\phi_1|\phi_2\rangle - \langle\phi_2|\phi_1\rangle| \qquad (4.9)$$

والان تجد بعد التعويض بقيم ϕ_1 و ϕ_2 في العلاقة السابقة والاستفادة من الخاصة الهرميتية لـ $\hat{A}-<\hat{A}>$ و $\hat{B}-<\hat{B}>$ ان

$$\Delta A\cdot\Delta B \geqslant \frac{1}{2}\left|\langle (A-\langle A\rangle)\Psi | (B-\langle B\rangle)\Psi\rangle - \langle (B-\langle B\rangle)\Psi | (A-\langle A\rangle)\Psi\rangle\right|$$

$$= \frac{1}{2}\left|\langle \Psi | (AB-BA)\Psi\rangle\right|$$

$$= \frac{1}{2}\left|\langle \Psi | \hat{C}\Psi\rangle\right|$$

$$\Rightarrow \Delta\hat{A}\cdot\Delta\hat{B} \geqslant \frac{1}{2}\left|\langle \hat{C}\rangle\right| \qquad (4.11)$$

اذا اخذنا مثلا $\hat{A}=x$ و $\hat{B}=\hat{p}$ ، حيث أن $[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$ ، يكون

$$\Delta\hat{x}\cdot\Delta\hat{p} \geqslant \hbar/2 \qquad (4.12)$$

تمرين : مادامت $\hat{H}\Psi=i\hbar\partial\Psi/\partial t$ اذن يمكن تمثيل الطاقة E بالمؤثر $i\hbar\partial/\partial t$. برهن على أن

$$\Delta E\cdot\Delta t \geqslant \hbar/2 \qquad (4.13)$$

تمرين : يمثل $\hat{L}_z$ في الاحداثيات القطبية بالمؤثر $-i\hbar\partial/\partial\phi$. برهن على أن

$$\Delta L_z\cdot\Delta\phi \geqslant \hbar/2 \ . \qquad (4.14)$$

برهن على أن القيم الخاصة للمؤثر $\hat{L}_z$ هي : 0 و $\pm\hbar$ و $\pm 2\hbar$ و ....

تمرين : برهن على أن

$$\Delta\hat{L}_x\cdot\Delta\hat{L}_y \geqslant \frac{\hbar}{2}\left|\langle\hat{L}_z\rangle\right| \qquad (4.15)$$

كيف تصبح هذه العلاقة عندما تكون الجملة في حالة Ψ_3 هي التابع الخاص لـ $\hat{L}_z$ الموافق للقيمة الخاصة $3\hbar$ ؟ كيف تصبح هذه العلاقة لما تكون الجملة في الحالة Ψ_0 ؟ (فسر هذه النتيجة) .

الفصل الخامس

تطبيقات على معادلة شرودنجر

١§ مؤثر هاميلتون ومعادلة شرودنجر :

لقد زودتنا المسلمة الثالثة في ميكانيك الكم بالطريقة العامة التي نبني وفقها المؤثر الكوانتي المقابل لملحوظ فيزيائي معطى . تبعا لهذه المسلمة نكتب اولا العبارة الكلاسيكية للملحوظ الفيزيائي كتابع في احداثيات الجملة ودفوعها ، ثم ننتقل من هذه الاحداثيات والدفوع الى المؤثرات الكوانتية الممثلة لها

$$x \longrightarrow \hat{x} = x \cdot \qquad p \longrightarrow \hat{p} = -i\hbar\, \partial/\partial x \tag{1.1}$$

ولايجاد المؤثر الكوانتي الممثل للملحوظ المعتبر نبدل $\hat{p}_i$ و $\hat{x}_i$ بالاحداثيات والدفوع ونحرص ان يكون المؤثر الناتج هرميتيا .

تُعتبر الطاقة من اهم الملحوظات المتعلقة بجملة ما . يُعبَّر عن الطاقة في الميكانيك الكلاسيكي بتابع هاميلتون

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + \hat{p}_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z, t) \tag{1.2}$$

ويكون بالتالي المؤثر الممثل للطاقة في الميكانيك الكوانتي

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x, y, z, t) \tag{1.3}$$

يُسمى المؤثر الاخير مؤثر هاميلتون وتعطى فيه عبارة اللابلاسيان في الاحداثيات الديكارتية بالعلاقة

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad (1.4)$$

أما في احداثيات معممة (q_1 , q_2 , q_3) فيأخذ اللابلاسيان عبارة طويلة يمكنك الاطلاع عليها في الملحق B § في الفصل IX .

عند ما يكون V مستقلا عن الزمن ، تدعى المعادلة الخاصة لموئثر هاميلتون

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V)\Psi = E\Psi \qquad (1.5)$$

معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن .

اما معادلة شرودنجر التابعة للزمن فهي بحسب المسلمة السابعة

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad (1.6)$$

وهي كما نرى معادلة تفاضلية جزئية من المرتبة الثانية في اربعة متحولات (x, y, z, t) ، وتصف هذه المعادلة تغير التابع الموجي Ψ بدلالة الزمن .

2§ الحالات المستقرة :

عند ما تكون الطاقة الكامنة مستقلة عن الزمن ، يمكن فصل معادلة شرودنجر التابعة للزمن (1.6) الى قسمين يتعلق احدهما بالاحداثيات المكانية فقط ، على حين يتعلق الآخر بالزمن فقط . من أجل تحقيق عملية الفصل نعبر عن التابع الموجي $\Psi(\underline{r},t)$ بالشكل

$$\Psi(\underline{r},t) = u(\underline{r})\, f(t) \qquad (2.1)$$

وبالتعويض في المعادلة (1.6) والقسمة على $\Psi = uf$ نجد

$$\frac{1}{u}(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V)u = i\hbar\frac{1}{f}\frac{df}{dt} \qquad (2.2)$$

يعني حل هذه المعادلة ايجاد تابع $u(\underline{r})$ وتابع $f(t)$ حيث يؤدي

تعوضهما في المعادلة الى تحققها مطابقة . لكن الطرف الأيسر يتعلق فقط بالاحداثيات المكانية على حين يتعلق الطرف الأيمن بالزمن فقط ، ويتغير كل من هذه المتحولات بصورة مستقلة عن بعضها الآخر . على هذا يمكن ان تتحقق هذه المعادلة فقط اذا كان طرفها الأول بعد التعويض مستقلا عن الاحداثيات المكانية وكان طرفها الثاني مستقلا عن الزمن . بعبارة ثانية يجب ان يساوى الطرفان ثابتا مشتركا E ، ومنه نجد :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)u = E\,u \tag{2.3}$$

$$i\hbar\,\frac{df}{f} = E\,dt \tag{2.4}$$

يقبل القسم المتعلق بالزمن (2.4) الحل

$$f(t) = c\,e^{-iEt/\hbar} \tag{2.5}$$

يسمى الجزء المكاني (2.3) معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن ، ويرمز ثابت الفصل E فيها الى طاقة الجسيم ، وذلك بحسب المسلمة الثالثة . بالفعل وبمقارنة صيغة التابع $f(t)$ بموجة دي بروي

$$\Psi = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} \tag{2.6}$$

وهي التابع الموجي لجسيم حر ، نرى ان $f(t)$ هو الجزء الزماني لهذه الموجة وان E ترمز الى طاقة الجسيم .

اذا كان u حلا لمعادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن (2.3) فان

$$\Psi(\underline{r},t) = u(\underline{r})\,e^{-iEt/\hbar} \tag{2.7}$$

يكون حلاً لمعادلة شرودنجر التابعة الزمن . ويتصف هذا الحل بصفة مهمة، اذ أنه بحساب القيمة المتوقعة للطاقة عندما تكون الجملة في الحالة المعينة بـ(2.7) في لحظة ما t ،

$$\begin{aligned}\langle H\rangle &= \int \Psi^* H\,\Psi\,d\tau = \int e^{iEt/\hbar}u^*\,e^{-iEt/\hbar}\,dt \\ &= \int u^* H\,u\,d\tau\end{aligned} \tag{2.8}$$

نجد أنها مستقلة عن الزمن ، وبالاستفادة من أن u تابع خاص لـ $\hat{H}$ نجد أن

$$\langle H \rangle = \int u^* H u \, d\tau = \int u^* E u \, d\tau = E \qquad (2.9)$$

اى ان القيمة المتوقعة لـ $\hat{H}$ من أجل الحل الخاص (2.7) هي E . وكنا قد برهنا على هذه النتيجة في شكلها العام في المسلمة السادسة . يتصف الحل (2.7) ايضا بأن كثافة الاحتمال

$$|\Psi|^2 = |e^{-iEt/\hbar} u|^2 = |u|^2 \qquad (2.10)$$

مستقلة عن الزمن . ينتج اذن ان احتمالات وجود الجسيم عن نقاط الفراغ مستقلة عن الزمن وتتبع الموضع فقط . من أجل هذه الاسباب يقال عن التوابع الموجية من الشكل (2.7) إنها تمثل حالات مستقرة ، وبالطبع لا يعني هذا بأية حال ان الجسيم ساكن .

يقابل الحالات المستقرة والى درجة عالية من الدقة سويات الطاقة المسموح بها في الذرات والنوى . كنا قد رأينا في الفيزياء الكمومية ، وسنرى ايضا في تطبيقاتنا على معادلة شرودنجر، ان شروط الانتظام البسيطة التي تفرض على التابع الموجي تجعل المعادلة (2.3) قابلة للحل من اجل قيم منقطعة لـ E . ويشابه هذا مسألة الوتر المثبت من طرفيه حيث تصطفي الشروط الحدية تواترات طبيعية للوتر . في ميكانيك الكم تربط علاقة بلانك $E = \hbar\omega$ طاقة محددة بكل تواتر طبيعي للموجة الجسيمية ، مما يدعم استناجنا بأن الوسيط E الذى يتعلق به التابع الموجي $\Psi(\underline{r}, t)$ للحالة المستقرة يمثل فعلا طاقة الحالة . (ولا نحاول هنا الاستفادة من المسلمة الثانية التي توصلنا مباشرة الى النتيجة) . نسمي قيم E التي تقبل من اجلها المعادلة (2.3) حلولا تحقق الشروط الحدية طيف معادلة شرودنجر او طيف الطاقة وقد يكون الطيف منقطعا ومستمرا او مؤلفا من جزء منقطع وجزء آخر مستمر . اذا وجدت طاقة دنيا لجملة فاننا نسمي الحالة المستقرة الموافقة الحالة الارضية او الحالة الدنيا تسمى الحالات المنقطعة الاخرى الحالات المهيجة .

نلفت الانتباه الى انه ليس ثمة في الذرة حالات منقطعة مهيجة دائمة الاستقرار، فلو حدث وجودها لما كان للخطوط الطيفية للذرة من وجود . فهذه الخطوط تنشأ عن انتقال الذرة في سوية مهيجة الى سوية ادنى مُصدرة في الوقت نفسه فوتونا ذا تواتر مناسب . لكن النقطة الاساسية هي ان هذه السويات المهيجة مستقرة الى درجة عالية من التقريب . فالدور الذى نقيس به مدى استقرار سوية هو من مرتبة دور الالكترون في مدار بور وهو حوالي 10^{-15} ثانية ، هذا بالمقارنة مع عمر الحالة المهيجة الذي هو بحدود 10^{-8} ثانية. وعلى هذا فان 10^{7} اهتزازة تحدث خلال حياة الحالة الذرية المهيجة ، وهو عدد يقارن بعدد الدورات التي قامت بها الارض حول الشمس خلال تاريخها والمساوى الى 10^{9} درجة تقريبا .

35 . بعض خواص حلول معادلة شرودنجر

من الواضح انه اذا كان u حلا لمعادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن مقابلا للقيمة الخاصة E فكذلك يكون αu $(\alpha \in \mathbb{C})$. اما اذا كان u_1 و u_2 حلين لهافان u_1+u_2 ليس حلا الا اذا قابل هذا الحلان القيمة الخاصة E نفسها . وعندما يوجد m حلا مستقلا خطيا لمعادلة شرودنجر يقابل كل منها القيمة الخاصة E نفسها، نقول كالمعتاد ان E متحللة من المرتبة m .

ذكرنا في المسلمة الاولى ان توابع الحالة (سواء كانتا ولم تكن حلولا لمعادلة شرودنجر) يجب أن تقبل الاستنظام اذا اردنا للتفسير الاحتمالي ان يكون صالحا ولقد رأينا قبل قليل ان حلول معادلة شرودنجر تتعين الى ثابت ضرب كيفي (وهو ما تتصف به توابع الحالة كافة) . لكن لدى اعتبار كثافة الاحتمال يجب العودة دوما الى الشكل المستنظم للتابع الموجي . ولقد ذكرنا ان الشكل الاخير يعين Ψ الى ثابت ضرب طويلته تساوى الواحد (اى الى ثابت ضرب من الشكل $e^{i\theta}$ حيث θ حقيقي). ويدل هذا على عدم وجود معنى فيزيائي مباشر لـ Ψ نفسه ، اما الكثافة الاحتمالية فلا تتأثر بعدم تعيين طور التابع الموجي ، لأنّ $|e^{i\theta}\Psi|^2 = |\Psi|^2$.

بما ان $\hat{H}$ مؤثر هرميتي لذلك تكون حلول معادلة شرودنجر المقابلة لقيم خاصة مختلفة متعامدة فيما بينها ، أي أن

$$\int u_n u_m \, d\tau = 0$$

على فرض ان $n \neq m$. اما اذا كانت $E_n = E_m = E$ فليس من الضرورة أن يتعامد التابعان الموجيان u_n و u_m . لكن يمكن بحسب غرام ـ شميدت تشكيل تركيبين خطيين

$$u'_m = u_n \, , \quad c\, u'_m = u_m - u_n \int u_n^* u_m \, d\tau \qquad (3.2)$$

ونختار الثابت c حيث يصبح u'_m مستنظما . ويكون التابعان الجديدان u'_n و u'_m متعامدين ويقابلان E ايضا ، ويمكن تعميم الطريقة الى اى عدد من التوابع.

من الواضح ان استنماد حلول معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن يؤدي الى تحقق الخاصة نفسها بالنسبة الى حلول معادلة شرودنجر التابعة للزمن . ونحصل على هذه النتيجة مباشرة بعد ملاحظة أن

$$\int \psi_n^* \psi_m \, d\tau = e^{i(E_n - E_m)/\hbar} \int u_n^* u_m \, d\tau \qquad (3.3)$$

نذكر ايضا ان معادلة شرودنجر التابعة للزمن لا متغيرة تحت عملية عكس الزمن فاذا اخذنا المرافق العقدى ل (1.6) واستبدلنا $-t$ ب t وجدنا

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\underline{r}, -t) + V \psi^*(\underline{r}, -t) = i\hbar \, \partial \psi^*(\underline{r}, -t)/\partial t \qquad (3.4)$$

ولهذه المعادلة الشكل (1.6) نفسه . ينتج من هذا انه اذا كان $\psi(\underline{r}, t)$ حلا للمعادلة (1.6) فان $\psi^*(\underline{r}, -t)$ هو حل لها ايضا . ينتج من الافادة الاخيرة أنه اذا كان $u(\underline{r})$ حلا لمعادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن فان $u^*(\underline{r})$ هو حل لها ويقابل u و u^* قيمة الطاقة E نفسها . يمكن ايضا ملاحظة هذا بأخذ المرافق العقدى للمعادلة (1.3) . اذا كانت E غير متحللة يكون u و u^*

منطبقين بعد غض النظر عن ثابت ضرب عقدى كيفي . ينتج من هذا ان التوابع الخاصة لمعادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن والمقابلة لقيم خاصة غير متحللة يمكن ان نختارها توابع حقيقية . وبصورة خاصة واذا وجدت طاقة دنيا لجملة فيمكن اختيار تابع الحالة الدنيا حقيقيا .

نذكر ايضا بصدد الشروط المفروضة على التابع الموجي ان المعنى الاحتمالي يقتضي ان يكون ψ وحيد القيمة وذلك لكي يكون لـ $|\psi|^2$ قيمة معينة وحيدة في كل نقطة من الفراغ ، اى لكي تشكل $|\psi|^2$ كثافة احتمالية بالمعنى الحق . هذا ولكي يمكن للمؤثر التفاضلي $\hat{H}$ ان يؤثر في ψ يجب ان يكون هذا الاخير قابلا للاشتقاق مرتين .

نلخص فيما يلي بعض الخواص الاساسية لحلول معادلة شرودنجر :

١- يقبل ψ الاشتقاق ولذلك فهو مستمر ووحيد القيمة .

٢- يقبل مشتق ψ الاشتقاق ولذلك تكون المشتقات الجزئية لـ ψ مستمرة ايضا .

٣- يقبل ψ الاستنظام ويقتضي هذا ، بالاضافة الى الخاصة (١) ، ان قيم ψ منتهية حيثما كان (ψ محدود) وأن ψ يسعى الى الصفر لما تسعى $\underline{r}$ الى اللانهاية .

٤- الحلول المقابلة لقيم خاصة مختلفة تكون متعامدة .

تمرين : برهن انه اذا كان ($\underline{r}$) ψ يقبل الاستنظام فان ψ و $\nabla\psi$ يسعيان الى الصفر عندما تسعى $\underline{r}$ الى اللانهاية ، اسرع من $r^{-3/2}$ و $r^{-5/2}$ على الترتيب .

تمرين : برهن على تعامد حلول معادلة شرودنجر بطريقة مباشرة .

برهان : ليكن u_1 و u_2 حلين خاصين يقابلان قيمتين خاصتين مختلفتين E_1 و E_2 . فيكون لدينا :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u_1 + V u_1 = E_1 u_1 \qquad (3.5)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u_2 + V u_2 = E_2 u_2 \qquad (3.6)$$

وبأخذ المرافق العقدى للمعادلة الاولى نجد

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla u_1^* + V u_1^* = E_1 u_1^* \qquad (3.7)$$

وبضرب (3.7) بـ u_2 و(3.6) بـ u_1^* وطرح (3.6)من (3.7) نجد :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[u_2\nabla^2u_1^* - u_1^*\nabla^2u_2\right] = (E_2-E_1)\,u_1^*u_2 \qquad (3.8)$$

وبالمكاملة على الفراغ والاستفادة من متطابقة غرين نجد :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_S\left[u_2\nabla u_1^* - u_1^*\nabla u_2\right]\cdot d\underline{s} = (E_2-E_1)\int u_1^*u_2\,d\tau$$

حيث S كرة تحيط بكل الفراغ. من الواضح ان التكامل في الطرف الايسر معدوم اذا كان ψ مستنظما ، وذلك لأن الجداء $u_2\nabla u_1^*$ (وكذلك $u_1^*\nabla u_2$) يسعى الى الصفر اسرع من r^{-4} عندما $r\to\infty$ ، وبذلك يسعى ماتحت رمز التكامل الى الصفر اسرع من r^{-2} عندما $r\to\infty$. ينتج اذن ان :

$$(E_2-E_1)\int u_1^*u_2\,d\tau = 0 \qquad (3.9)$$

وبما ان $E_1\neq E_2$ فعلاقة الاستعماد محققة .

§ 4. الحل العام لمعادلة شرودنجر

كنا قد رأينا ان موئثر هاميلتون $\hat{H}$ خطي ومن الواضح ان الموئثر التفاضلي $\partial/\partial t$ خطي ايضا ، ينتج اذن ان معادلة شرودنجر التابعة للزمن خطية . اذا كان ψ_1 و ψ_2 و . . حلولا خاصة لمعادلة شرودنجر التابعة للزمن مقابلة لقيم الطاقة E_1 و E_2 و . . . . فان كل تركيب خطي فيها هو حل لهذه المعادلة وذلك بسبب خطيتها . رأينا ان الحلول المستقرة تعطى بحلول خاصة من الشكل :

$$\psi_n(\underline{r},t) = e^{-iE_nt/\hbar}\,u_n(\underline{r}) \qquad (4.1)$$

وعلى هذا يُعطى الحل العام لمعادلة شرودنجر التابعة للزمن بالعبارة :

$$\Psi(\underline{r},t) = \sum_n c_n\,e^{-iE_nt/\hbar}\,u_n(\underline{r})\,. \qquad (4.2)$$

قد تتساوى عدة قيم E_n في المجموع السابق ويحدث ذلك عندما يكون ثمة تحلل في

الطاقة ، فاذا وجدت قيمة E للطاقة متحللة من المرتبة m،وجد m تابعا مستقلا خطيا ψ_{k_1} و ψ_{k_2} و ... و ψ_{k_m} تقابل جميعا الطاقة $E_{k_1} = E_{k_2} = \cdots = E_{k_m} = E$ نفسها . في هذه الحالة يمكن ان نستبدل بالتوابع ψ_{k_1} و .... و ψ_{k_m} توابع اخرى ψ'_{k_1} و .... و ψ'_{k_m} مستعمدة مستنظمة وتقابل جميعا القيمة الخاصة E . بناء على هذا يمكن ان نعتبر ، ودون فقدان طابع التعميم ، ان التوابع التي تظهر في المجموع (4.2) مستعمدة .

يمكن تعيين الثوابت c_n اذا عرفنا تابع الحالة للجملة في لحظة ما ، ولتكن مثلا $t = 0$. فاذا فرضنا ان الجملة توصف في هذه اللحظة بتابع الحالة المعلوم :

$$\psi_0 = \psi(\underline{r}, 0) = \sum_n c_n u_n$$

كان لدينا

$$\int u_k^* \psi_0 \, d\tau = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int u_k^* u_n \, d\tau = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{kn} = c_k \tag{4.4}$$

ويكون تابع الحالة للجملة في كل لحظة t معينا تماما

$$\psi(\underline{r}, t) = \sum_n \left[\int u_n^*(\underline{r}) \, \psi(\underline{r}, 0) \, d\tau \right] u_n(\underline{r}) \, e^{-iE_n t/\hbar} \tag{4.5}$$

نلخص مما سبق بقولنا : لايجاد الحل العام لمعادلة شرودنجر التابعة للزمن. نجد اولا الحلول الخاصة u_n لمعادلته المستقلة عن الزمن ثم نجد الحلول الموافقة لمعادلته التابعة للزمن وذلك باستعمال (4.1) ، ويكون الحل العام معطى بالمعادلة (4.2) . اذا عُلِم التابع الموجي في لحظة ما ($t = 0$) مثلا تعينت الامثال c_n بالعلاقة (4.4) ويكون حل معادلة شرودنجر الذى يحقق هذا الشرط الابتدائي هو (4.5) .

تمرين : بفرض ان جملة كانت في اللحظة $t = 0$ في حالة معينة بالتابع الموجي $\psi_1(\underline{r}, t) = u_1(\underline{r})$. اى انها كانت في الحالة الخاصة u_1 . ماذا يصبح تابع الحالة في لحظة لاحقة t ؟ .

تمرين : لتكن لدينا جملة مؤلفة من جسيم في بئر كموني لا متناه في العمق ولنفـــرض أن الجسيم كان في اللحظة $t=0$ في الحالة $\psi(x,0)=1$. ماهو حل معادلـــة شرودنجر التابعة للزمن والمحقق للشرط الابتدائي السابق .

§ 5 . تطبيق: حركة جسيم حر

نطبق هنا معادلة شرودنجر لدراسة حركة جسيم لا يخضع لأية قوة ، ولذلك تكون طاقته الكامنة ثابتة $V=V_0$ ، وتكون معادلة شرودنجر من اجل بعد واحد

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\psi=0 \qquad (5.1)$$

اذا وضعنا

$$k^2=2m(E-V_0)/\hbar^2 \qquad (5.2)$$

نجد بعد ملاحظة ان $E-V_0$ تمثل الطاقة الحركية للجسيم $p^2/2m$ ، العلاقـــة $p=\hbar k$. وتصبح معادلة شرودنجر (5.1) بناء على (5.2)

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0 \qquad (5.3)$$

وهي تطابق معادلة السعات في الامواج المستقرة ، حيث يُعطى طول الموجـــة بالعلاقة $\lambda=2\pi/k$. وهكذا نجد ان طول موجة الجسيم .

$$\lambda=2\pi/(p/\hbar)=h/p \qquad (5.4)$$

وهي طبعا طول موجة دي بروي المتعلقة بالجسيم .

تقبل المعادلة (5.3) الحلين الخاصين :

$$(i)\quad \psi_+=e^{ipx/\hbar} \qquad (ii)\quad \psi_-=e^{-ipx/\hbar} \qquad (5.5)$$

ويوافق الاول جسيما حرا دفعه p وطاقته $E=V_0+p^2/2m$ يتحرك بالاتجاه $+x$ ، على حين يوافق الثاني جسيما حرا له قياس الدفع نفسه والطاقة نفسها ويتحرك بالاتجاه $-x$.

اذا وجد الجسيم في الحالة ψ_+ فنحن على يقين من ان دفعه $p=\hbar k$ ، ولكنا

في جهل تام عن موضعه ، ذلك لانه بحسب مبدأ هايزنبرغ يكون الشك في تعيين الدفع معدوما $\Delta p = 0$ ، مما يقتضي ان الشك في تعيين الموضع غير منته $\Delta x = \infty$. يمكن ان نصل الى هذه النتيجة ايضا من المعادلة (5.5) . فمن الواضح ان التابع ψ_+ لا يقبل الاستنظام

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_+^* \psi_+ \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} 1 \, dx = \infty \qquad (5.6)$$

لهذا السبب لا نستطيع هنا الحديث عن كثافة الاحتمال وانما عن الاحتمال النسبي. وبملاحظة ان $|\psi_+|^2 = 1$ مستقلة عن الموضع ، نستنتج ان احتمال وجود الجسيم عند نقطة ما مساو لاحتمال وجوده عند اية نقطة اخرى . تنطبق ملاحظات مماثلة اذا ما وجد الجسيم في الحالة ψ_- .

يمكن ان نفهم موجه دي بروى (5.5 i) على انها ممثل لسيل من الجسيمات دفع كل منها $\underline{p} = m\underline{v}$ وبكثافة جسيم واحد في واحدة الحجم . يمر اذن في المتوسط v جسيما عبر واحدة السطوح المتعامدة مع اتجاه الحركة خلال واحدة الزمن ، وتكون اذن كثافة تيار الجسيمات $\underline{j} = \underline{v}$.

بما ان E متحللة ، اذن يكون :

$$\psi = A e^{ipx/\hbar} + B e^{-ipx/\hbar} \qquad (5.7)$$

حل للمعادلة (5.3) يقابل E ايضا . وهذا الحل تركيب حركتين موجيتين تتم احدهما بالاتجاه $+x$ والاخرى بالاتجاه $-x$. ويمكن ان نعتبره ممثلا لسيل من الجسيمات لكل منها الطاقة E ، وكثافته الجسيمية $|A|^2 + |B|^2$ يتحرك $|A|^2$ منها بالاتجاه $+x$ و $|B|^2$ منها بالاتجاه $-x$. ويكون عدد الجسيمات التي تخترق واحدة السطوح المتعامدة مع اتجاه الحركة خلال واحدة الزمن :

$$\underline{j} = \underline{v} \{ |A|^2 - |B|^2 \} \qquad (5.8)$$

وهو كثافة تيار الجسيمات .

نلاحظ هنا ان دفع الجسيم وطاقته يمكن ان يأخذا أية قيمة ولا قيد عليهما

سوى ان الطـــاقة الكلية E يجب الا تقل عن V_0 فلو فرضنا موقتا خلاف ذلـــك لكان علينا استبدال k^2 بـ $-k^2$ في (5.3) واستبدال ip بـ p في (5.5) وبذلك نجد أن

$$\psi_+ = e^{px/\hbar} \quad , \quad \psi_- = e^{-px/\hbar} \tag{5.9}$$

ولكن هذين الحلين غير مقبولين ولا يمثلان تابعين موجيين نظرا الى تباعد الأول عند $+\infty$ وتباعد الثاني عند $-\infty$.

أما حلا معادلة شرودنجر التابعة للزمن فهما بحسب (5.5) و (5.7) موجتا دي بروى

$$\psi_\pm = e^{-i(Et \mp px)/\hbar} \tag{5.10}$$

§6. انحفاظ الاحتمال وتدفق الجسيمات :

بما ان مربع طويلة التابع الموجي يمثل الكثافة الاحتمالية المتعلقة بالجسيم فيجب ان ترتبط حركة الجسيم بتطور التابع الموجي مع الزمن ، أى بحركة المعينة بمعادلـــة شرودنجر التابعة للزمن . ولكي يكون المفهوم الاحتمالي للتابع الموجي منسجمـــا داخليا يلزم تحقق ما يلي : اذا كان احتمال وجود الجسيم

$$P = \int_\tau \psi^* \psi \, d\tau \tag{6.1}$$

في حجم τ يتناقص في لحظة معينة فيجب ان يزداد احتمال وجوده خارج هذا الحجم بالمعدل نفسه في تلك اللحظة . ينتج اذن انه لكي يخلو المفهوم الاحتمالي للتابـــع الموجي من التناقض الداخلي تحقق قانون انحفاظ الاحتمال ، ويتحقق هذا الاخيـــر بحسب نظرية غوص التكاملية ـ اذا امكن تعريف كثافة تيار احتمالي $\underline{j}$ يحقق مع الكثافة الاحتمالية $\rho = \psi^*\psi$ معادلة الاستمرار

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{j} = 0 \tag{6.2}$$

تشبه حالتنا الراهنة انحفاظ المادة في ميكانيك السوائل او انحفاظ الشحنة في الالكترودیناميك .

لدراسة تدفق الاحتمال عبر سطح S يحيط بحجم τ ، نحسب اولا معدل تغير احتمال وجود الجسيم ضمن هذا الحجم ، ولذلك نشتق (6.1) بالنسبة الى الزمن

$$\frac{dP}{dt} = \int_{\tau} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) d\tau \tag{6.3}$$

وبالاستفادة الآن من معادلة شرودنجر ومن مرافقها العقدي نجد العلاقة

$$\frac{dP}{dt} = \frac{i\hbar}{2m} \int_{\tau} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) d\tau \tag{6.4}$$

باستخدام نظرية غرين يُحوّل التكامل الحجمي في الطرف الايمن الى تكامل سطحي

$$\frac{dP}{dt} = \frac{i\hbar}{2m} \int_{S} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \cdot \underline{dS} = -\int_{S} \underline{j} \cdot \underline{dS}$$

تدل هذه المعادلة على أن تدفق الحقل الشعاعي

$$\underline{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \tag{6.6}$$

عبر السطح S يساوي ويعاكس بالاشارة معدل تغير احتمال وجود الجسيم في الحجم τ المحصور بهذا السطح . بناء على هذا نعرف كثافة التيار الاحتمالي بالحقل الشعاعي $\underline{j}$ المعطى بالعلاقة (6.6) .

باستخدام نظرية غوص التكاملية نكتب (6.5) على الصورة

$$\frac{dP}{dt} + \int_{\tau} \nabla \cdot \underline{j} \; d\tau = 0 \tag{6.7}$$

وبالاستفادة من (6.1) ومن تعريف ρ ، على الصورة

$$\int_{\tau} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{j} \right) d\tau = 0 \tag{6.8}$$

وبما ان الحجم τ كيفي ، تكون معادلة الاستمرار (6.2) محققة بالكميتين ρ و $\underline{j}$ المعرفتين كما سبق .

لنعتبر كمثال الموجة المستوية (موجة د ى بروى) في لحظة معينة :

$$\psi = e^{i\underline{p}\cdot\underline{r}/\hbar} \tag{6.9}$$

ولنحسب كثافة تيار الاحتمال . بما أن $\nabla\psi = \frac{ip}{\hbar}\psi$ لذلك نجد

$$\underline{J} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\psi\frac{ip}{\hbar} + \frac{ip}{\hbar}\psi^*\psi\right) = \frac{p}{m} = \underline{v} \tag{6.10}$$

وهو يطابق كثافة تيار الجسيمات الذى يمثله التابع الموجي (6.9) . وتوضح هذه النتيجة المعنى الاحصائي لكثافة تيار الاحتمال .

كمثال آخر نعتبر التابع الموجي

$$\psi = A e^{i\underline{p}\cdot\underline{r}/\hbar} + B e^{-i\underline{p}\cdot\underline{r}/\hbar} \tag{6.11}$$

وبحساب كثافة تيار الاحتمال الموافق لهذا التابع الموجي نجد

$$\underline{J} = \{|A|^2 - |B|^2\}\,\underline{p}/m \tag{6.12}$$

وهو يطابق كثافة تيار الجسيمات التي حسبناها في البحث السابق .

نذكر ختاما انه اذا كانت كثافة تيار الاحتمال تسعى الى الصفر أسرع من $1/r^2$ عندما تسعى r الى اللانهاية ، فنجد بتطبيق نظرية غاوص على الحد الثاني من (6.8) أن

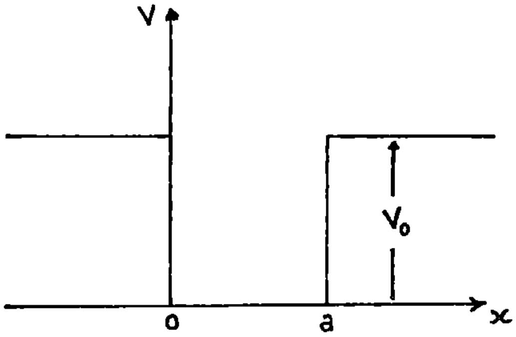
$$\int_{\text{الفراغ}} \nabla\cdot\underline{J}\, d\tau = \int_S \underline{j}\cdot d\underline{s} \sim \int_S r^{-2+p}\, r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\phi = 0 \tag{6.13}$$

وهنا p عدد موجب و S كرة تحيط بالفراغ . ينتج من المعادلتين (6.8) و (6.13) أن

$$\frac{d}{dt}\int \rho\, d\tau = 0 \tag{6.14}$$

مما يعني ان المعادلة الموجية تضمن انحفاظ النظم ، فاذا كان ψ مستنظما في لحظة t بقي كذلك في أية لحظة لاحقة .

لنفرض ان الطاقة الكامنة لجسيم يتحرك على المحور x تتوزع تبعا للعلاقة



$$V = 0 \quad x \in (0, a)$$
$$V = V_0 \quad x \notin (0, a) \qquad (7.1)$$

حيث ان $V_0 > 0$ ثابتة .

اذا كانت طاقة الجسيم محصورة بين 0 و V_0 ($0 < E < V_0$) فنجد بحسب المفاهيم الكلاسيكية أن حركة الجسيم تبقى محدودة في الحيّز $0 < x < a$ وذلك لأن الطاقة الحركية للجسيم تكون موجبة فقط ضمن هذا الحيز . وعندما يصل الجسيم الى جدار البئر (عند $x = 0$ أو $x = a$) يتلقى صدمة تعيده الى داخل البئر وذلك لأن $\partial V/\partial x$ كبير للغاية عند جدار البئر (نفهم بالطبع الكمون السابق على أنه صورة مثالية للحالة الواقعية التي يتغير فيها الكمون فجأة وبسرعة ، ولكن بشكل مستمر ، عند جداري البئر) . تسمى حالة كلاسيكية كهذه حالة مغلقة (او محدودة)

أما اذا كانت $E > V_0$ فان الجسيم يتحرك باتجاه واحد من $-\infty$ الى $+\infty$ او بالعكس، ولكن سرعته تزداد خلال مروره عبر بئر الكمون ، بحسب مبدأ انحفاظ الطاقة ، بكمية تبقى على الطاقة الكلية ثابتة خلال الحركة كلها . واذا كان الجسيم في لحظة البدء في بئر الكمون فانه يتحرر منه . تسمى حالة كهذه حالة مفتوحة (أو غير محدودة) .

تؤلف الطاقة بمفردها هنا مجموعة تامة من الملحوظات الفيزيائية ، ومن السهل أن نرى أن طاقة الجسيم يمكن ان تأخذ أية قيمة نختارها من اجل الحالات المفتوحة. بعبارة ثانية يوجد من اجل كل $E > V_0$ حالة مفتوحة . وهكذا يكون طيف طاقة الجسيم والموافق لحالاته المفتوحة مستمرا . أما من اجل الحالات المغلقة ($0 < E < V_0$) فنرى أن معادلة شرودنجر تكتب بالشكل

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \qquad (7.2)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi = 0 \qquad (7.3)$$

وبوضع

$$k^2 = 2mE/\hbar^2 \quad , \quad -\alpha^2 = 2m(E-V_0)/\hbar^2 \qquad (7.4)$$

حيث ان k و α موجبان نجد أن

$$\psi = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x} \qquad x<0 \qquad (7.5)$$

$$= Ce^{ikx} + De^{-ikx} \qquad 0<x<a \qquad (7.6)$$

$$= Fe^{\alpha x} + Ge^{-\alpha x} \qquad x>a \qquad (7.7)$$

وبما ان ψ يجب ان يبقى محدودا ، لذلك نرى أن $B = F = 0$. من استمرار التابع الموجي عند $x = a$ و $x = 0$ نجد ان

$$A = C + D \qquad (7.8)$$

$$Ce^{ika} + De^{-ika} = Ge^{-\alpha a} \qquad (7.9)$$

ومن استمرار مشتقات ψ عند جدارى البئر نجد ان

$$\alpha A = ik(C - A) \qquad (7.10)$$

$$ik\{Ce^{ika} - De^{-ika}\} = -\alpha G e^{-\alpha a} \qquad (7.11)$$

وبحذف A و G بين المعادلات الاربعة الاخيرة نحصل على

$$Ce^{-i\theta} + De^{i\theta} = 0 \qquad (7.12)$$

$$Ce^{i(ka+\theta)} + De^{-i(ka+\theta)} = 0 \qquad (7.13)$$

حيث ان

$$1+\frac{ik}{\alpha} = re^{i\theta} \quad (7.14)$$

اذا كان $C = D = 0$ انعدم التابع الموجي بحسب (7.8)و(7.9) مما يعني أنه ليس هنالك أى جسيم . ولكن المعادلتين (7.12)و(7.13) تملكان حلا غير تافه في C و D اذا كان معين الامثال معدوما :

$$\begin{vmatrix} e^{-i\theta} & e^{i\theta} \\ e^{i(ka+\theta)} & e^{-i(ka+\theta)} \end{vmatrix} = 0 \quad (7.15)$$

اى اذا كان

$$e^{2i(ka+2\theta)} = 1 \quad (7.16)$$

ومنه نجد ان

$$2ka + 4\theta = 2n\pi \quad (7.17)$$

حيث ان n عدد صحيح موجب او سالب أو صفر . وبالتعويض من اجل θ من المعادلة (7.14) يصبح الشرط السابق على الشكل

$$\frac{1}{2}ka + \tan^{-1}\frac{k}{\alpha} = \frac{1}{2}n\pi \quad (2.18)$$

أو

$$\begin{cases} \alpha/k = -\tan(ka/2) & (n \text{ زوجي}) \\ \quad\;\; = \cot(ka/a) & (\text{فردى}) \end{cases} \quad (7.19)$$

ومن المعادلات (7.4) ينتج ان

$$\alpha^2 = \chi^2 - k^2 \quad (7.20)$$

حيث ان

$$\chi^2 = 2mV_0/\hbar^2 \quad (7.21)$$

وهكذا نبحث عن k التي تحقق احدى المعادلتين التاليتين

$$k(\chi^2-k^2)^{-1/2} = -\tan\tfrac{1}{2}ka \qquad (7.22)$$
$$k(\chi^2-k^2)^{-1/2} = \cot\tfrac{1}{2}ka$$

بوسم التوابع $k(\chi^2-k^2)^{-1/2}$ و $-\tan\frac{1}{2}ka$ و $\cot\frac{1}{2}ka$ بدلالة k، يتضح لنا أن للمعادلتين السابقتين حلولا k_1 و k_2 و . . . . و k_j تحقق المتراجحات

$$0<k_1<\frac{\pi}{a}<k_2<\frac{2\pi}{a}<k_3<\frac{3\pi}{a}<\dots<k_j<\frac{j\pi}{a} \qquad (7.23)$$

حيث ان j أصغر عدد صحيح يحقق المتراجحة $j\pi/a>\chi$.

هذا ونلاحظ ان الحل $k=0$ حل غير مقبول لأنه يجعل $E=0$ ويكون من ثم الحل العام لـ(7.2)هو $C+D\chi$، وهو يقود الى ان $a\alpha=-2$ وهو شرط لا يمكن تحقيقه لان a و α موجبان .

وهكذا اظهرنا اذن ان k مكممة ، وينتج من هذا ان طيف القيم الخاصة للحالات المغلقة منقطع ويتألف من j قيمة وهي سويات طاقة في الحالة المغلقة. واستناداً الى هذا واذا قيست طاقة الجملة ووجد انها في حالة مغلقة فنتيجة القياس هي احدى القيم $E_i=(\hbar k_i)^2/2m$، $(i=1,2,\dots,j)$.

سوف نحسب الآن التوابع الموجية الموافقة للقيمة E_i للطاقة . من المعادلة (7.12) نستنتج أن

$$C/D = -e^{i\theta}/e^{-i\theta} \qquad (7.24)$$

وبالتعويض في المعادلة (7.6) نجد

$$\psi = \eta\sin(kx+\theta) \qquad 0<x<a \qquad (7.25)$$

حيث ان η ثابت . ينتج الان من المعادلات (7.8)و(7.9)و(7.17) ان

$$A=\eta\sin\theta \quad , \quad G=(-1)^{n-1}\eta e^{\alpha a}\sin\theta \qquad (7.26)$$

وبناء عليه

$$\psi = \eta e^{\alpha x} \sin\theta \qquad x<0 \tag{7.27}$$
$$= (-1)^{n-1} \eta e^{\alpha(a-x)} \sin\theta \qquad x>a$$

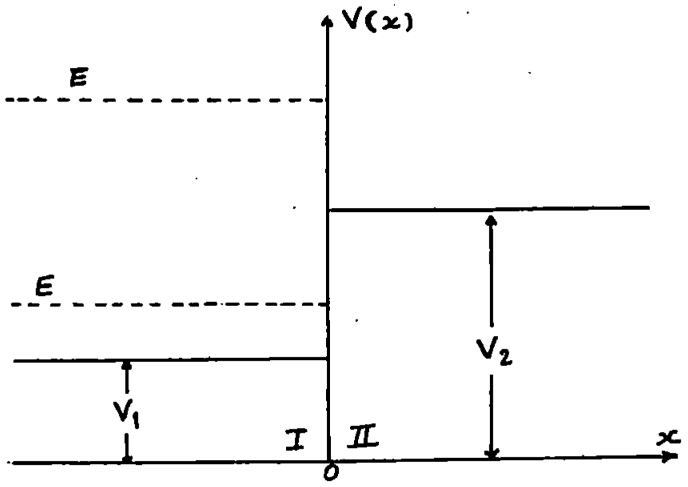
نختار الان قيمة η حيث يصبح ψ مستنظما ، ونجد ان

$$\eta = \sqrt{2\alpha/(2+a\alpha)} \tag{7.28}$$

يمثل الان $|\psi|^2 dx$ احتمال ان نجد أن احداثية الجسيم ، عقب قياس مباشر لطاقته ، واقعة فمن مجال dx حول النقطة x . نلاحظ انه بالرغم من ان $\psi \to 0$ عند ما $x \to \pm\infty$ ، فان ψ لا ينعدم خارج المجال $(0, a)$. ويقتضي هذا ان هنالك احتمال في وجود الجسيم خارج هذا المجال . ولكن بحسب المفاهيم الكلاسيكية نرى أنه من المستحيل على الجسيم ان ينفذ الى خارج هذا المجال ، لأنه لو حدث ذلك لاصبحت طاقة الجسيم الحركية سالبة ، طالما ان الطاقة الكلية محفوظة . برغم هذا فان النتيجة التي حصلنا عليها لا تقتضي بأية حال ان الطاقة غير محفوظة في ميكانيك الكم ، فنحن نعلم ان الطاقة $\hat{H}$ والاحداثي $\hat{x}$ غير متآلفين مادام $\hat{H}$ و $\hat{x}$ لا يقبلان التبديل ، ولذلك وعندما نقيس E تتهيأ الجملة في حالة خاصة ل $\hat{H}$ وهي ليست حالة خاصة ل $\hat{x}$ ، ولهذا لا يشغل الجسيم أي مكان محدد ، وتقود تجربة لاحقة لتعيين $\hat{x}$ الى أية قيمة من المحور الحقيقي . أي قد نعثر على الجسيم في أى موضع من المحور الحقيقي . واذا لوحظ ان الجسيم يقع خارج البئر فلا نستطيع ان نفترض ان الطاقة الحركية له سالبة وذلك لأن عملية ملاحظة موضعه تتسبب في تغيير غير معلوم في طاقة الجسيم اذ تتدفق الطاقة من جهاز القياس الى الجسيم وبالعكس ، ولذلك لا تبقى الطاقة على القيمة التي لوحظت في تجربة قياسها والتي سبقت تجربة قياس x . وبالحقيقة لا تبقى قيمة الطاقة عقب قياس x معلومة ابدا بل تكون منتشرة على طيف من القيم باحتمالات مختلفة . ولمعرفة قيمتها الجديدة يجب قياسها وينتج من القياس قيمة للطاقة اكبر أو أصغر من V_0 ، وهذا لا يتعارض مع حقيقة اننا كنا قد لاحظنا قبل التجربة الاخيرة الجسيم خارج البئر . فبعد قياس الطاقة لم نعد نعلم أين يوجد الجسيم مطلقا .

ندرس في هذا البحث حركة جسيم على المحور x . نفترض ان الجسيم يتحرك بحرية الا عند النقطة $x=0$ التي يتعرض عندها لصدم مفاجىء . يمكن اذن ان نمثل الطاقة الكامنة للجسيم بالتابع

$$V(x) = V_1 \qquad x < 0$$
$$V(x) = V_2 \qquad x > 0 \qquad (8.1)$$



(ش . 2)

يسمى هذا الشكل للطاقة عتبة كمونية .

وبالحقيقة فليس ثمة من كمون فيزيائي يُظهِر هذا التَغيُّر المفاجىء ومن المعقول ان نتصور ان تغير الكمون ناعم كما يَظهَر في الخط المنقط في (ش . 2) . تُبدي مثلا الالكترونات الحرة في معدن تغيرات مستمرة في طاقتها الكامنة عند سطحه .

من الواضح من (8 . 1) ان القوة المؤثرة في الجسيم $F = -dV/dx$ معدومة في كل مكان الا عند $x = 0$. فاذا كان $V_2 > V_1$ وجدنا ان dV/dx موجب وكبير للغاية، ولذلك تتعرض الجسيمات الساقطة على العتبة من اليسار الى صدمة تتجه عكس المحور x.

قبل أن نبدأ بالدراسة الكوانتية للحركة ، نتطرق الى الاعتبارات الكلاسيكية، التي تدل على انه اذا كانت طاقة الجسيم في لحظة ما تساوي E فانها تبقى كذلك لأنَّ حقل القوى محافظ ، ويكون

$$\frac{1}{2m} p_1^2 + V_1 = E = \frac{1}{2m} p_2^2 + V_2 \qquad (8.2)$$

حيث ان p_1 و p_2 هما دفعا الجسيم قبل النقطة 0 وبعدها على الترتيب .

نميز الان الحالتين

١) الحالة $E > V_2$: اذا فرضنا ان الجسيمات تَرِدُ من الجهة اليسرى وجد نسا كلاسيكيا انها تَعْبُرُ جميعا الى المنطقة II لكن سرعتها تتضاءل لان طاقتها الحركية تصبح $T = E - V_2$. ولدراسة الحركة من الوجهة الكوانتية نكتب معادلة شرودنجر من أجل المنطقة I ($x < 0$) والمنطقة II ($x > 0$) :

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{p_1^2}{\hbar^2}\psi_1 = 0 \qquad (x<0) \tag{8.3}$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{p_2^2}{\hbar^2}\psi_2 = 0 \qquad (x>0) \tag{8.4}$$

والحلان العامان لهاتين المعادلتين هما (ندل على ψ في المنطقة I بالرمز ψ_1 وفي المنطقة II بالرمز ψ_2)

$$\psi_1 = A\, e^{ip_1x/\hbar} + B\, e^{-ip_1x/\hbar} \qquad x<0 \tag{8.5}$$

$$\psi_2 = C\, e^{ip_2x/\hbar} + D\, e^{-ip_2x/\hbar} \qquad x>0 \tag{8.6}$$

ومن استمرار ψ ومشتقه عند $x = 0$ نجد

$$A + B = C + D \tag{8.7}$$

$$p_1(A-B) = p_2(C-D) \tag{8.8}$$

اما شكل التابع الموجي كتابع للزمن ايضا فهو بحسب (8.5)و(8.6)

$$\psi_1(x,t) = A\, e^{-i(Et-p_1x)/\hbar} + B\, e^{-i(Et+p_1x)/\hbar} \qquad (x>0) \tag{8.9}$$

وهو يمثل كما رأينا سابقا تركيب قطارين من الجسيمات ينتشران بجهتين متعاكستين . وينطبق تفسير مشابه على عبارة ψ في المنطقة II .

من الواضح ان الجسيمات التي تعبر الى المنطقة II وتُمَثَّل بالتالي بالتابع الموجي ψ_2 تسلك سلوك جسيم حر ذي دفع معين p_2 (موجب) ، ولذلك يجب

أن ينعدم الحد الثاني في (8.6) والذى يمثل جسيما حرا يسير بالاتجاه $-x$ ، ويتحقق هذا إذا كان $D = 0$. وبحل المعادلتين (8.7)و(8.8) بعد وضع $D = 0$ فيهما ، نجد

$$B = \frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2} A \qquad C = \frac{2p_1}{p_1 + p_2} A \tag{8.10}$$

بما ان B غير معدومة اذن ينعكس بعض الجسيمات عند O ، ويدل عدم انعدام C على ان بعضها ينفذ الى داخل المنطقة II . ولكي نستوعب نتائجنا بشكل أفضل نعود الى التابع الموجي $\Psi(x,t)$ المعطى بالعلاقة (8.9) وبعلاقة مماثلة من اجل $\Psi_2(x,t)$. يمكن ان نفهم هذا التابع الموجي ، من وجهة نظر احصائية على أنه يوافق عددا كبيرا من الجسيمات المتماثلة غير المتفاعلة فيما بينها والتي اطلقت بشروط ابتدائية متطابقة (اى بالقيمة E نفسها) . وبما ان تعيين E لا يعين اتجاه حركة الجسيم نتوقع ان نستطيع تمييز سيلين من الجسيمات يتحرك اولهما يسارا والآخر يمينا . وينطبق تفسيرنا هذا على كل من قطارى الامواج المعينين بـ $\Psi_1(x,t)$ و $\Psi_2(x,t)$ في المنطقتين I و II . بناء على هذا تدل المعادلة (8.9) على أنه يوجد في المنطقة I سيل من الجسيمات يتحرك نحو المبدأ O بكثافة جسيمات قدرها $|A|^2$ وسيل آخر يتحرك بعيدا عن المبدأ بكثافة جسيمات قدرها $|B|^2$. وتكون كثافة تيارَيّ السيلين $v_1|A|^2$ و $v_1|B|^2$ على الترتيب . وبالمثل يوجد في المنطقة II سيلا جسيمات كثافتا تياريهما هما $v_2|C|^2$ و $v_2|D|^2$ على الترتيب .

ولكي نحافظ على الحالة المستقرة التي وصفناها يجب ان نضع منبعين للجسيمات عند $-\infty$ و $+\infty$. يُزوَّد هذان المنبعان بمسرع للجسيمات يقوم بتسريع كل منها الى أن تصل طاقتها الى E ثم يطلقها بموازاة المحور x . ويمكن التحكم بقيمتي $|A|$ و $|B|$ بالتحكم بشدة الحزمتين المولّدتين عند $-\infty$ و $+\infty$ على الترتيب .

لنعتبر الآن الحالة التي تنشأ عندما يكون لدينا مولد واحد للجسيمات موضوع عن $x = -\infty$. في هذه الحالة يكون $D = 0$ ، وأما $|A|$ فيمكن التحكم بها واعتبارها

معلومة . ويكون لدينا الآن حزمة واحدة $A\exp(\frac{ip_1x}{\hbar})$ تسقط على الحاجز وينتج عنها حزمة منعكسة $B\exp(-ip_1x/\hbar)$، وحزمة نافذة $C\exp(ip_2x/\hbar)$. تتعين شدتي الحزمة المنعكسة والنافذة بـ $|B|^2$ و $|C|^2$ على الترتيب . فاذا رمزنا بـ $j=v_1|A|^2$ لكثافة تيار الحزمة الواردة ، وجدنا بحسب (8.10) ان كثافتي الحزمتين المنعكسة والنافذة هما

$$j_r = v_1|B|^2 = j\,(p_1-p_2)^2/(p_1+p_2)^2 \tag{8.11}$$

$$j_t = v_2|C|^2 = 4p_1p_2\,j/(p_1+p_2)^2 \tag{8.12}$$

على الترتيب . ونجد ان العلاقة التالية محققة بين كثافات تيارات الحزم الواردة والمنعكسة والنافذة

$$j = j_r + j_t \tag{8.13}$$

وهو نتيجة ضرورية طالما ان كل جسيم من الحزمة الواردة اما ان ينعكس او ان ينفذ. وتكون نسبة الجسيمات النافذة من اصل الجسيمات الواردة

$$T = j_t/j = 4p_1p_2/(p_1+p_2)^2 \tag{8.14}$$

وتسمى T عامل النفوذية . اما نسبة الجسيمات المنعكسة فهي

$$R = j_r/j = (p_1-p_2)^2/(p_1+p_2)^2 \tag{8.15}$$

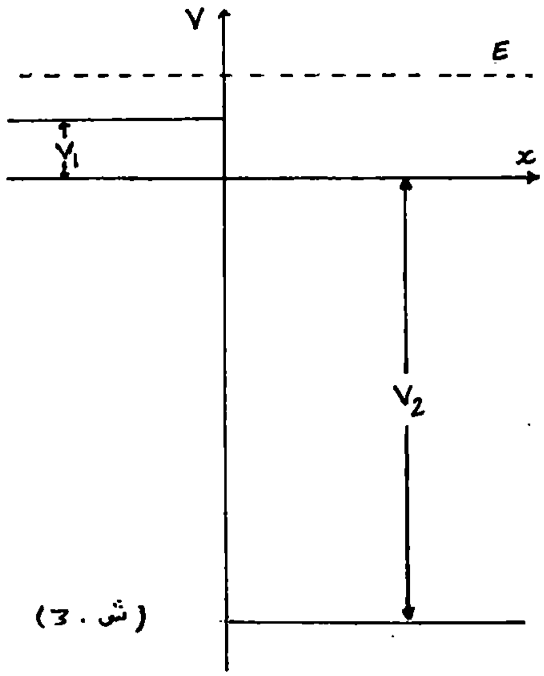
ويسمى R عامل الانعكاس . من اجل جسيم واحد يسقط على الحاجز ، يمثل T احتمال نفوذ الجسيم و R احتمال انعكاسه . عندما يتناقص ارتفاع العتبة ، يقترب p_1 من p_2 ويقترب من ثم R من الصفر و T من الواحد

$$V_2 \longrightarrow V_1\ ,\quad R \longrightarrow 0\ ,\quad T \longrightarrow 1 \tag{8.16}$$

نلاحظ ان انعكاس بعض الجسيمات عند العتبة ($V_2 > V_1$) خاصة تميز الحقول عامة عندما تصادف في انتشارها انقطاعاً في الخواص الفيزيائية للوسط . وهذا السلوك معروف تماما في حالة الامواج الكهرطيسية وامواج المرونة . وكمثال اوضح على الظاهرة الاخيرة ، نعتبر الحالة التي يكون فيها V_2 سالبا ولكنه اكبر بكثير بالقيمة المطلقة من

الطاقة الحركية $p_1^2/2m$ ، في هذه الحالة يكون $p_1 << p_2$ ومن (8.11) و (8.12) نجد ان

$$j_r = 1 \quad , \quad j_t = 0 \qquad (8.17)$$



(ش . 3)

في الحركة الكلاسيكية تمر الجسيمات فوق العتبة بسرعة متزايدة ، لكن كوانتياً وكما تدل عليه العلاقتان (8.17) تجابه الجسيمات انعكاساً كلياً . لوحظت هذه الظاهرة في الفيزياء النووية فعندما يقترب نيوترون بطيء السرعة من النواة ينعكس بفعل الكمون الشديد الجاذب الذي يطبقه عليه فجأة حقل القوى النووية .

٢) الحالة $V_1 < E < V_2$: يدلنا الميكانيك الكلاسيكي هنا على أن الجسيم لا يمكن ان يوجد على يمين O لأن طاقته الحركية بحسب (8.2) تصبح سالبة وهو مستحيل ولذلك فان $x > 0$ هي منطقة محرمة كلاسيكيا . ويعني هذا مثلا ان الالكترونات الحرة في معدن والتي طاقاتها اصغر من V_2 لا يمكن ان تتحرر من المعدن ولذلك تعود اليه بعد وصولها الى سطحه .

من ناحية كوانتية نرى ان الحلين (8.5) و (8.6) يبقيان صالحين ، ولكن p_2 الآن تخيلي صرف ، ولذلك نضع

$$p_2 = i\gamma \qquad \gamma = \sqrt{2m(V_2 - E)} \qquad (8.18)$$

ويكتب التابع الموجي في المنطقة II بالشكل

$$\psi_2 = (C e^{-\gamma x/\hbar} + D e^{\gamma x/\hbar}) e^{-iEt/\hbar} \qquad (8.19)$$

ولا يمكن تفسيره طبعا كزوج من قطارى الامواج ، ولا يمكن تفسير C و D بالطريقة السابقة مطلقا . وبما ان التابع الموجي يجب يكون محدودا حيثما كان لذلك يجب

ان تكون D معدومة وبحل المعادلتين (8.7) و (8.8) بعد وضع $p_2 = i\gamma$ ، نجد

$$B = \frac{p_1 - i\gamma}{p_1 + i\gamma} A \quad , \quad C' = \frac{2p_1}{p_1 + i\gamma} \tag{8.20}$$

ان عدم انعدام C يدل على ان بعض الجسيمات تنفذ الى المنطقة II . لكن وبما ان

$$|B|^2 = \left| \frac{p_1 - i\gamma}{p_1 + i\gamma} A \right|^2 = |A|^2 \Rightarrow J_r = J \tag{8.21}$$

فان كل الجسيمات الواردة تنعكس بما فيها تلك التي تنفذ قليلا الى المنطقـــة II .
اما كثافة الاحتمال النسبية في المنطقة II فهي

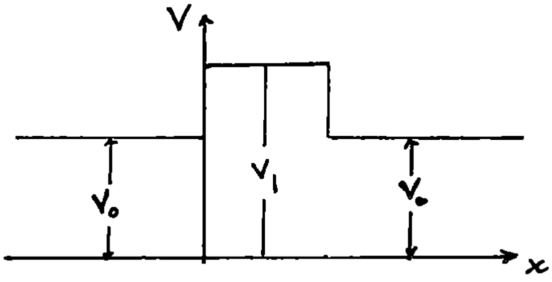
$$|\psi|^2 = |c|^2 e^{-2\gamma x/\hbar} = \frac{4p_1^2}{p_1^2 + \gamma^2} |A|^2 e^{-2\gamma x/\hbar} \tag{8.22}$$

$$= \frac{4(E - V_1)}{V_2 - V_1} |A|^2 e^{-2\gamma x/\hbar} ,$$

وتدل على أن احتمال نفوذ الجسيم يتناقص بازدياد عمق النفوذ وفق علاقة اسيـــــــة.
اما التناقض الظاهري القائم على ان انخفاض طاقة الجسيم على القيمة E يمنعها مـــن دخول المنطقة II ، فيحل بالمحاكمة التي قدمناها في نهاية البحث السابق .

§ 9 . ظاهرة النفـــق

لنفرض ان سيلا متجانسا من الجسيمات دفع كل منها يساوى p يتحرك بالاتجاه $+x$ ويسقط على حاجز كموني



$$V = V_1 \quad x \in (0, a)$$
$$V = V_0 \quad x \notin (0, a) \tag{9.1}$$

حيث إن $V_1 > V_0$. اذا افترضنـــا ان الطاقة الكلية E للجسيم اصغـــــــر من V_1 وجدنا كلاسيكيا ان كل الجسيمات تنعكس عن الحاجز ولا يمكن اى منها النفوذ

عبره . ولكن امثلتنا الكوانتية السابقة تدل على ان بعض الجسيمات تنفذ الى داخل الحاجز وقد ينفذ جزء منها عبر الحاجز مشكلا ما يعرف بظاهرة النفق .

يكون التابع الموجي في المنطقة $x < 0$

$$\psi = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} \tag{9.2}$$

حيث تُعيّن A شدة الحزمة الساقطة وتعين B شدة الحزمة المنعكسة . وفي المنطقة $0 < x < a$ نجد

$$\psi = Ce^{\gamma x/\hbar} + De^{-\gamma x/\hbar} \tag{9.3}$$

حيث ان

$$-\gamma^2 = 2m(E - V_1) \tag{9.4}$$

وفي المنطقة $x > a$ يكون

$$\psi = F e^{ipx/\hbar} \tag{9.5}$$

يقود استمرار التابع الموجي ومشتقه عند انقطاعات الطاقة الكامنة الى المعادلات

$$A + B = C + D \tag{9.6}$$

$$A - B = i\alpha(D - C) \tag{9.7}$$

$$Ce^{\gamma a/\hbar} + De^{-\gamma a/\hbar} = Fe^{ipa/\hbar} \tag{9.8}$$

$$i\alpha[De^{-\gamma a/\hbar} - Ce^{\gamma a/\hbar}] = Fe^{ipa/\hbar} \tag{9.9}$$

حيث ان

$$\alpha = \frac{\gamma}{p} = \sqrt{\frac{V_1 - E}{E - V_0}} \tag{9.10}$$

بحذف B و C و D بين المعادلات السابقة والحل بالنسبة الى F نجد

$$\frac{F}{A} = \frac{e^{-ipa/\hbar}}{ch(\gamma a/\hbar) + \frac{1}{2}i(\alpha - 1/\alpha)\, sh(\gamma a/\hbar)} \tag{9.11}$$

وتكون الا ن النسبة بين كثافتي التيار للحزمتين السا قطة والنافذ ة

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = 1/\{1 + \tfrac{1}{4}(\alpha + 1/\alpha)^2 sh^2(\gamma a/\hbar)\} \qquad (9.12)$$

أى أن نسبةً T من الحزمة الساقطة تنفذ عبر الحاجز .

اذا كان γa صغيرا بالمقارنة مع $\hbar$ فيمكن ان نأخذ $sh(\gamma a/\hbar) \approx \gamma a/\hbar$ ، ويكون

$$T = 1/\{1 + \tfrac{1}{4}(\alpha + 1/\alpha)^2(\gamma a/\hbar)^2\} \qquad (9.13)$$

$$\approx 1 - \tfrac{1}{4}(\alpha + 1/\alpha)^2(\gamma a/\hbar)^2$$

وذلك بعد النشر في شلسلة هندسية واهمال الحدود العليا في ($\gamma a/\hbar$). اما اذا كان γa كبيرا بالمقارنة مع $\hbar$ فعندئذ يكون

$$sh(\gamma a/\hbar) \approx \tfrac{1}{2} e^{\gamma a/\hbar} \qquad (9.14)$$

ويكون من ثم

$$T \approx 16(\alpha + \tfrac{1}{\alpha})^{-2} e^{-2\gamma a/\hbar} \qquad (9.15)$$

يمكن ان نرسم الا ن منحني تحول T بدلالة $\gamma a/\hbar$. ونرى ان T تابع متناقص باطراد في a ، وأنه يسعى الى الصفر لما تصبح a كبيرة جدا . وكما نتوقع فان الحاجز يصبح كامل الفعالية ويعكس كل الجسيمات الوارد ة عليه عند ما يزداد عرضه ، أى أن $|A|^2$ تساوى $|B|^2$ في هذه الحالة ، كما وجدنا في حالة العتبة الكمونية التي تؤلف وضعية حدية لحاجز عريض تسعى فيه a الى $+\infty$.

§ ١٥ . نموذج الا لكترون الحر

وفق نموذج الا لكترون الحر للمعادن نعتبر الا لكترونات التكافؤية للذرات المشكلة للمعدن قابلة للحركة بحرية كاملة ضمن الحجم الذى تشغله العينة المعدنية المعتبرة. ان الا لكترونات التكافؤية مسؤولة عن الناقلية الكهربائية للمعدن ولهذا السبب تسمى ايضا الكترونات النقل تمييزا لها عن الكترونات الطبقات الداخلية الممتلئة للب الا يون

في تقريب الالكترون الحر يُهمَل تفاعل الكترونات النقل مع ايونات الذرات وتُجرى كل الحسابات وكأن الكترونات النقل حرة تماما في المنطقة المحددة بسطوح العينة المعتبرة .

لايجاد سويات الطاقة للالكترون الحر في عينة معدنية نبدأ اولا بمسألة مبسطة وهي حساب سوية الطاقة لالكترون يتحرك في المجال $[0, L]$. وبما ان القوى المؤثرة على الالكترون وفق نموذجنا الحالي معدومة عند كل نقطة داخل العينة لذلك تكون معادلة شرودنجر

$$d^2\psi/dx^2 + k^2\psi = 0 \tag{10.1}$$

حيث ان

$$k^2 = 2mE/\hbar^2 \tag{10.2}$$

ولهذه المعادلة حلان خاصان مستقلان

$$\psi_k = c_1 e^{ikx} \qquad \psi_{-k} = c_2 e^{-ikx} \qquad (k>0) \tag{10.3}$$

وهما يمثلان موجتين لدي بروى مسافرتين باتجاه المحور x وعكسه على الترتيب . ويمكن أن ندمج الحلين في صيغة واحدة

$$\psi_k = c\, e^{ikx} \tag{10.4}$$

حيث يمكن k ان تكون موجبة او سالبة ($k = \pm\sqrt{2mE}/\hbar$) . اما الشروط الحدية التي تُفرض على التابع الموجي وفق هذا النموذج فهي

$$\psi(0) = \psi(L) \Rightarrow 1 = e^{ikL} \qquad \text{(بحسب (10.4))} \tag{10.5}$$

$$\Rightarrow k_n = 2n\pi/L \qquad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \tag{10.6}$$

وتكون من ثم القيم الخاصة لطاقة الالكترون

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{2\pi^2 n^2 \hbar^2}{mL^2} \qquad (n \in \mathbb{Z}) \tag{10.7}$$

وتكون التوابع الموجية الموافقة بعد الاستنظام

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i 2\pi n x/L} \qquad (n \in \mathbb{Z}) \tag{10.8}$$

تدل العلاقة (10.7) على ان طاقة الالكترون منقطعة . وعندما تصبح L كبيرة جـــدا

تقترب السويات (10.7) من بعضها جدا لتؤلف متصلا شبه مستمر .

في حالة عينة معدنية مكعبة الشكل (صندوق كموني مكعب) ، يكون لمعادلـــة

شرودنجر

$$\nabla^2 \psi + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0 \tag{10.9}$$

الحل المستنظم

$$\psi_{\underline{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \underline{k}\cdot\underline{r}} \tag{10.10}$$

حيث ان V حجم الجسم الصلب المحتجز فيه الالكترون و $\underline{k} = (k_x, k_y, k_z)$ الشعـــاع

الموجي . تأخذ التوابع الموجية لطاقة الالكترون تحت الشروط الحدية ،

$$\psi(0,x,y) = \psi(L,x,y) \;,\; \psi(x,0,z) = \psi(x,L,z) \,,\, \psi(x,y,0) = \psi(x,y,L) \tag{10.11}$$

الاشكال

$$\psi_{\underline{n}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \frac{2\pi}{L}(n_x x + n_y y + n_z z)} \,, \tag{10.12}$$

حيث ان

$$\underline{k} = (k_x, k_y, k_z) = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z) = \frac{2\pi}{L}\underline{n} \tag{10.13}$$

$$n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots \tag{10.14}$$

وتكون القيم الخاصة للطاقة المقابلة للتوابع السابقة

$$E_{\underline{n}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \tag{10.15}$$

$$= \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 n^2 \tag{10.16}$$

يتضح من العلاقة (10.12) ان التوابع الخاصة لطاقة الالكترون تتعين بالمركبات

الثلاثة للشعاع $\underline{n}$ ،او بالمركبات الثلاثة للشعاع الموجي $\underline{k}$ (بالاضافة الى العدد الكمي السبيني m_s) . استنادا الى هذا تتعين حالة الالكترون بالرباعية (n_x , n_y , n_z , m_s) أو بالرباعية (k_x , k_y , k_z , m_s) . وكما هي الحال في البعد الواحد نرى ان سويات طاقة الالكترون (10.15) منقطعة ولكنها تصبح مستمرة عندما تتناهى ابعاد الحيز الى اللانهاية .

يجب ان نذكر ان الكترونات النقل تشغل سويات طاقة الالكترون الوحيد بما يتفق ومبدأ باولي والقاضي بأنه لا يمكن الكترونين ان يشغلا الحالة الكوانتية نفسها . بعبارة ثانية لا يمكن حالتي الكترونين ان تتعينا بالرباعية (n_x , n_y , n_z , m_s) نفسها . تتوقف طاقة الالكترون بحسب (10.16) على n^2 ، واعتمادا على باولي يمكن ان تُشغَل سوية الطاقة الموافقة لـ$n^2=0$ بالكترونين تتعين حالتاهما بالرباعيتين $(0 , 0 , 0 , \pm 1/2)$ ، وسوية الطاقة الموافقة لـ $n^2=1$ باثني عشر الكترونا تتعين حالاتها بالرباعيات $(\pm 1, 0, 0, \pm 1/2)$ و $(0, \pm 1, 0, \pm 1/2)$ و $(0, 0, \pm 1, \pm 1/2)$ وهكذا . . . في درجة الصفر المطلق تكون كل السويات الواقعة تحت سوية معينة ممتلئة بالالكترونات . تسمى السوية التي تشكل الحد الفاصل بين السويات الممتلئة والسويات الفارغة سوية فيرمي .

§ 11 . الشروط الدورية على التابع الموجي في البلورة ـ نظرية بلوخ

تنشأ البلورة المثالية من تكرار غير منته في الفراغ لواحدات بناء اساسية متطابقة وتتركب البلورة المثالية من ذرات مرتبة في شبكة معرفة بثلاثة انسحابات اساسية $\underline{a}$ و $\underline{b}$ و $\underline{c}$ ، بشكل يبدو فيه الترتيب الذرى عندما ينظر اليه من موضع $\underline{r}$ مطابقا تماما لما يبدو عليه عندما ينظر اليه من النقطة

$$\underline{r}' = \underline{r} + n_1 \underline{a} + n_2 \underline{b} + n_3 \underline{c} \tag{11.1}$$

حيث ان n_1 , n_2 , n_3 اعداد صحيحة كيفية . تعرّف مجموعة النقاط $\underline{r}'$ المعينة بجميع قيم الثلاثية (n_1 , n_2 , n_3) شبكة . فالشبكة اذن هي ترتيب دوري منتظم لنقاط في الفراغ ، وينشأ التركيب البلوري عندما تأخذ الذرات مواقعها في نقاط الشبكة . تسمى

اشعة الانسحاب

$$\underline{R} = n_1 \underline{a} + n_2 \underline{b} + n_3 \underline{c} \tag{11.2}$$

اشعة الانسحاب البلورية ، وهي تنقل البلورة الى وضعمطابق تماما لما كانت عليه قبل الانسحاب.

سوف نعامل الالكترونات الحرة في البلورة على انها مجموعة من الجسيمات غير المتفاعلة تشغل سويات الطاقة الممكنة للالكترون الواحد طبقا لقواعد احصاء فيرمي - وبسبب الترتيب الدوري للبلورة تكون الطاقة الكامنة للالكترون والناتجة من تفاعله مع ايونات البلورة دورية ، ويساوى دورها في كل اتجاه اساسي دور البلورة في ذلك الاتجاه.

$$V(\underline{r} + \underline{R}) = V(\underline{r}) \tag{11.3}$$

لايجاد سويات الطاقة المختلفة لاحد الالكترونات يجب أن نحل معادلة شرودنجر

$$\nabla^2 \Psi(\underline{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(\underline{r})\right]\Psi = 0 \tag{11.4}$$

ويجب ان نعلم أنه ليس بين أيدينا شروط حدية جاهزة نفرضها على التابع الموجي وانما يجب أن نحل المعادلة (11.4) تحت شروط يجب ان نعينها .

نظرية بلوخ

تُعد نظرية بلوخ تعبيرا رياضيا عن شكل التابع الموجي للالكترون في حقل كموني دوري . ولتبسيط النظرية نكتب معادلة شرودنجر (11.4) من اجل شبكة بلورية وحيدة البعد دورها a ، وهي

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + f(x)\,\Psi(x) = 0 \tag{11.5}$$

حيث ان

$$f(x) = 2m(E - V)/\hbar^2 \tag{11.6}$$

والتابع ($f(x)$ ، مثل تابع الكمون ($V(x)$ ، دورى ودوره يساوى دور البلورة .

$$f(x + a) = f(x) \tag{11.7}$$

بما ان المعادلة (11.5) معادلة خطية من المرتبة الثانية لذلك يوجد من اجل كل قيمة لـ E حلان مستقلان خطيا $g(x)$ و $h(x)$ ، ويكون الحل العام لها تركيب خطي في هذين الحلين

$$\psi(x) = A g(x) + B h(x) \tag{11.8}$$

حيث ان A و B ثابتان كيفيان . وبما أن $f(x+a) = f(x)$ لذلك فان $g(x+a)$ و $h(x+a)$ يحققان المعادلة (11.5) . ولهذا يجب ان ينتجان من الحل العام (11.8) باعطاء قيم خاصة للثابتين A و B ، أى أن

$$g(x+a) = \alpha_1 g(x) + \alpha_2 h(x) \tag{11.9}$$

$$h(x+a) = \beta_1 g(x) + \beta_2 h(x) \tag{11.10}$$

حيث ان α_1 و α_2 و β_1 و β_2 ثوابت . ويكون بالتالي

$$\psi(x+a) = A g(x+a) + B h(x+a)$$

$$= (\alpha_1 A + \beta_1 B) g(x) + (\alpha_2 A + \beta_2 B) h(x) \tag{11.11}$$

وبما ان احتمال وجود الالكترون في اماكن متكافئة في البلورة متساوية ، لذلك يكون

$$\psi(x+a) = \lambda \psi(x) \qquad (|\lambda| = 1) \tag{11.12}$$

حيث ان λ عدد طويلته تساوى الواحد ويجب تعيينه . بمقارنة (11.11) مع (11.8) نجد ان (11.12) تتحقق اذا كان

$$\begin{aligned} (\alpha_1 - \lambda) A + \beta_1 B &= 0 \\ \alpha_2 A + (\beta_2 - \lambda) B &= 0 \end{aligned} \tag{11.13}$$

تقبل جملة المعادلتين المتجانستين السابقة حلا غير تافه في A و B اذا كان

$$0 = \begin{vmatrix} \alpha_1 - \lambda & \beta_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - (\alpha_1 + \beta_1)\lambda + (\alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1) = 0 \tag{11.14}$$

ويعين حل هذه المعادلة التربيعية في λ قيمتين لها تتحقق بهما العلاقة (11.12) اذا رمزنا لهذين الحلين بالرمزين λ_1 و λ_2 ، كان

$$\begin{aligned} \psi(x+a) &= \lambda_1 \psi(x) \\ \psi(x+a) &= \lambda_2 \psi(x) \end{aligned} \tag{11.15}$$

نعرّف الا ن كميتين k_1 و k_2 بالعلاقتين

$$\lambda_1 = e^{ik_1 a} \quad , \quad \lambda_2 = e^{ik_2 a} \tag{11.16}$$

ونعرف $u_{k_1}(x)$ و $u_{k_2}(x)$ كالتالي

$$u_{k_1}(x) = e^{-ik_1 x}\,\psi(x) \quad , \quad u_{k_2}(x) = e^{-ik_2 x}\,\psi(x) \tag{11.17}$$

ومن الواضح الآن أن

$$\begin{aligned} u_{k_1}(x+a) &= e^{-ik_1(x+a)}\,\psi(x+a) \\ &= e^{-ik_1(x+a)}\,\lambda_1\,\psi(x) \\ &= e^{-ik_1(x+a)}\,e^{ik_1 a}\,\psi(x) \\ &= e^{-ik_1 x}\,\psi(x) = u_{k_1}(x) \end{aligned} \tag{11.18}$$

وذلك بالاستفادة من (11.17) و (11.16) و (11.15) . ونرى ان التابع $u_{k_1}(x)$ دوري ودوره يساوي a . ويقال الكلام نفسه بخصوص $u_{k_2}(x)$.

بحسب العلاقتين (11.17) يمكن ان نكتب $\psi(x)$ دوما بالشكل

$$\psi_k(x) = e^{ikx}\,u_k(x) \tag{11.19}$$

حيث ان $u_k(x)$ دوري ودوره يساوي a ،وحيث تمثل k احدى الكميتين k_1 أو k_2 . يسمى تابعموجي من الشكل (11.19) تابع بلوخ ،وهو أعم شكل يمكن ان تكتب وفقه حلول معادلة شرودنجر التي تقود الى كثافات احتمال متساوية في الخلايا البلورية المختلفة . فمن الواضح ان

$$\begin{aligned} \psi(x+na) &= e^{ik(x+na)}\,u_k(x+na) \\ &= e^{ik(x+na)}\,u_k(x) \\ &= e^{ikna}\,\psi(x) \end{aligned} \tag{11.20}$$

ويكون من ثم

$$|\Psi(x+Na)|^2 = |\Psi(x)|^2 \qquad (11.21)$$

في حالة البعد الواحد ، وعند ما تكون البلورة غير منتهية يمكن ان نجد حلا لمعادلة شرودنجر من اجل كل قيمة للطاقة E ضمن مجالات معينة . ويقابل كل قيمة لـ E بحسب (11.19) و (11.16) قيمتين لـ k . وتكون قيم الطاقة E ضمن هذه المجالات مستمرة . اما اذا كانت البلورة منتهية الامتداد ، فعندئذ يجب ان تحقق حلول معادلة شرودنجر (11.4) شروطا حدية مناسبة عند طرفي البلورة (على سطوح البلورة في حالة الابعاد الثلاثة) . ولهذا فان هذه الحلول لا توجد الا من اجل قيم معينة منقطعة لـ E . وبما انه مقابل كل قيمة خاصة E توجد قيمتان لـ k ، لذلك فان قيم k في هذه الحالة تكون منقطعة ايضا . وعند ما يصبح عدد الذرات في البلورة كبيراً جدا تقترب قيم E (وكذلك k) جدا من بعضها ، وبرغم انها لا تزال منقطعة فانه يمكن اعتبارها عصابات شبه مستمرة من القيم المسموح بها . ويحدث الشيء نفسه من اجل الابعاد الثلاثة سوى انه يوجد في هذه الحالة اكثر من قيمتين لـ k من اجل كل قيمة خاصة للطاقة .

اذا فرضنا مثلا شروطا حدية دورية على بلورة ذات بعد واحد ، او فرضنا بشكل مكافىء ان للبلورة شكل حلقة مغلقة تحوى N ذرة ، فعندئذ يجب ان يحقق التابع الموجي (11.19) الشرط

$$\Psi(x+Na) = e^{ikNa}\,\Psi(x) = \Psi(x) \qquad (11.22)$$

وذلك لكي يكون وحيد التعيين . ويؤدى هذا الى ان

$$e^{ikNa} = 1 \qquad (11.23)$$

$$\Rightarrow e^{ika} = \sqrt[N]{1} = e^{2\pi i n/N} \quad (n=0,1,2,\ldots,N-1) \qquad (11.24)$$

وبأخذ لوغاريتم الطرفين ثم الحل بالنسبة الى k نجد

$$k_n = 2\pi n / Na \qquad (n = 0, 1, 2, \dots, N-1) \tag{11.25}$$

اذا كان N كبيرا فعندئذ يكون لـ k قيما مسموحا بها بالقدر المعطى بالعلاقة الاخيرة، ويمكن في هذه الحالة النظر الى قيمها على انها شبه مستمرة . وبالطبع فان الـ N قيمة متمايزة لـ k والمسموح بها بحسب(11.25) لا تقابل جميعها نفس قيمة الطاقـــة فلقد رأينا انه من أجل كل قيمة ثابتة لـ E يوجد فقط قيمتان مسموح بهما لـ k كمـــا تدل على ذلك العلاقة (11.16) .

في حالة البلورة المنتهية الامتداد يكون لدينا بحسب(20 . 11) و (25 . 11)

$$\psi_n(x+a) = e^{ik_n a}\,\psi(x) = e^{i\left(\frac{2\pi n}{Na}\right)a}\,\psi(x) \tag{11.26}$$

وتعرف هذه العلاقة بشرط بلوخ على التابع الموجي في حالة البلورة المنتهية الامتداد ومن الواضح ان مشتق التابع الموجي $d\psi/dx$ يحقق شرط بلوخ ايضا .

تسير المحاكمة في حالة بلورة ثلاثية البعد ومنتهية الامتداد بطريقة مماثلة لمـــا سبق . فتكون البلورة دورية وفق ثلاثة اتجاهات اساسية نفترض انها متعامدة بغيـــة التسهيل . وتنطبق الان شروط دورية على التابع الموجي مماثلة لتلك التي استنتجـــت قبل لحظة . اذ نفترض ان هذه الشروط محققة على سطوح متوازي مستطيلات اضلاعه G_1a و G_2b و G_3c ، حيث ان G_1 و G_2 و G_3 اعداد صحيحة كبيرة . ونجد بسبـــب وحدانية قيم التابع الموجي شرط بلوخ مكتوبا بالشكل

$$\psi_n(x+a, y+b, z+c) = e^{ik_x a + ik_y y + ik_z z}\,\psi_{n\ell m}(x,y,z)$$

حيث ان n و ℓ و m اعداد صحيحة ، وحيث ان

$$k_x = \frac{2\pi n}{G_1 a}, \quad k_y = \frac{2\pi m}{G_2 b}, \quad k_z = \frac{2\pi \ell}{G_3 c} \tag{11.28}$$

$$(n = 0, 1, \dots, G_1 - 1;\ \ell = 0, 1, \dots, G_2 - 1;\ m = 0, 1, \dots, G_3 - 1)$$

وبوضع

$$\underline{R}_i = \underline{R}_{pqr} = p\underline{a} + q\underline{b} + r\underline{c} \; ; \; \underline{k} = (k_x, k_y, k_z)$$

حيث ان p و q و r اعداد صحيحة ، نكتب شرط بلوخ بالشكل

$$\psi_{\underline{k}}(\underline{r} + \underline{R}_i) = e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_i}\,\psi_{\underline{k}}(\underline{r})$$

وكما هي الحال في البعد الواحد ، تأخذ $\underline{k}$ بحسب (11.28) قيما منقطعة ولكن عند ما تسعى G_1 و G_2 و G_3 الى اللانهاية يجبان نعامل $\underline{k}$ كمتحول مستمر .

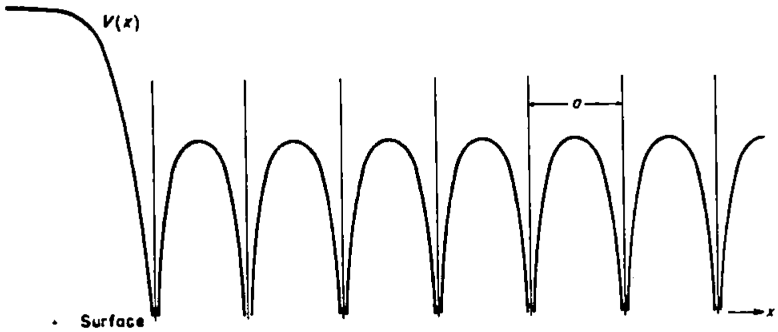


FIGURE 5. Schematic representation of the potential within a perfectly periodic crystal lattice. The surface potential barrier is shown at the left.

تمثيل تخطيطي للكمون في بلورة تامة الدورية ويظهر حاجز الكمون السطحي في اليسار

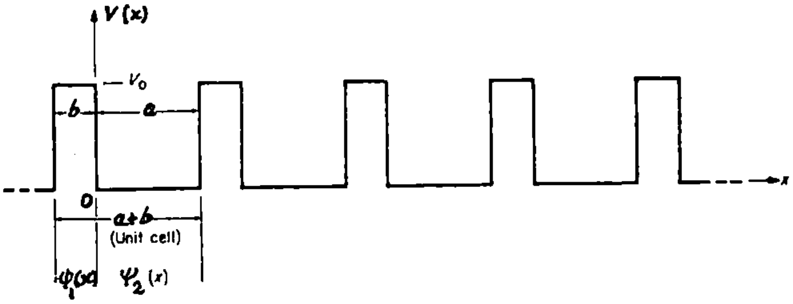
§ 12 . نموذج كرونيغ وبني لبلورة غير منتهية ذات بعد واحد

من اجل كمون ناشىء عن تكرار دوري غير منته لبئر كموني مربع (ش.) ، يمكن حل معادلة شرودنجر حلا تاما . ولقد قام كرونيغ وبني عام 1931 بايجاد هذا الحل وبالرغم من ان هذا الكمون هو حالة مثالية تقرب الكمون الفعلي للالكترون في البلورة تقريبا خشنا ، الا أنه مفيد جدا في توضيح الخواص الاساسية المميزة للالكترون في شبكة بلورية . تعطى الطاقة الكامنة للالكترون بالعلاقة

$$V(x) = 0 \quad \text{if } \exists n \in \mathbb{Z} : x - n(a+b) \in [0, b]$$

(12.1)

$$V(x) = V_0 \quad \text{فيما عدا ذلك}$$



(ش ٦)

يمكن ان نعتبر ان الآبار الكمونية تمثل الأيونات في التركيب البلورى وأن الهضاب تمثل الكمون الفاصل بينها . تحسب سويات الطاقة الموافقة لهذا النموذج بحل معادلة شرودنجر المتعلقة بالكترون وحيد في الحقل الكموني (12.1)

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi = 0 \qquad (12.2)$$

سوف نرى الآن أن الطاقة التي يمتلكها الكترون في بلورة تؤلف عصابات ، ويفصل بين كل عصابة واخرى فجوات لا يمكن طاقة الالكترون ان تقع فيها . بعبارة اخرى سوف ندرس كيف تظهر عصابات الطاقة والمجالات المحظورة نتيجة للشروط الدورية المفروضة على التابع الموجي ومشتقه

$$\psi_k(x+a+b) = e^{i(a+b)k}\,\psi_k(x) \qquad (12.3)$$

$$\frac{d\psi_k}{dx}(x+a+b) = e^{i(a+b)k}\,\frac{d}{dx}\psi_k(x) \qquad (12.4)$$

بوضع $V=0$ في معادلة شرودنجر (12.2) نجد ان حل هذه المعادلة في أى من الآبار الكمونية وليكن مثلا $0 \le x \le a$:

$$\psi_1 = A\cos\alpha x + B\sin\alpha x \qquad (12.5)$$

حيث ان

$$\alpha^2 = 2mE/\hbar^2 \qquad (12.6)$$

ويكون حل معادلة شرودنجر (12.2) في أي من الهضاب ($V = V_0$) ، ولتكن مثلا الهضبة الكمونية $-b \le x \le 0$

$$\psi_2 = C \cos \beta x + D \sin \beta x \qquad (12.7)$$

حيث ان

$$\beta^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2 \qquad (12.8)$$

أما الشروط الحدية الواجب فرضها على التابع الموجي فتنشأ من :

١) استمرار ψ ومشتقه $d\psi/dx$ عند $x = 0$

٢) الشروط الدورية (أو شرط بلوخ)

$$\psi(a) = e^{i(a+b)k} \psi(-b) ; \quad \frac{d\psi}{dx}(a) = e^{i(a+b)k} \frac{d\psi}{dx}(-b) \qquad (12.9)$$

وبالطبع تنطبق شروط مماثلة من اجل كل بئر كموني وهضبه كمونية . من العلاقة (12.7) نجد ان

$$\psi_2(0) = C \quad , \quad \psi_2'(0) = \beta D \qquad (12.10)$$

ويكون من ثم

$$\psi_2(-b) = \cos\beta b \, \psi_2(0) - \frac{1}{\beta} \sin\beta b \, \psi_2'(0) \qquad (12.11)$$

$$\psi_2'(-b) = \beta \sin \beta b \, \psi_2(0) + \cos \beta b \, \psi_2'(0) \qquad (12.11)'$$

ومن المعادلة (12.5) نجد ان

$$\psi_1'(0) = \alpha B \quad , \quad \psi_1(0) = A \qquad (12.12)$$

ولذلك نجد

$$\psi_1(a) = \cos \alpha a \, \psi_1(0) + \frac{1}{\alpha} \sin \alpha a \, \psi_1'(0) \qquad (12.13)$$

$$\psi_1'(a) = -\alpha \sin\alpha a \, \psi_1(0) + \cos \alpha a \, \psi_1'(0) \qquad (12.13)'$$

نكتب المعادلتين (12.11) بالشكل المصفوفي

$$\begin{bmatrix} \psi_2(-b) \\ \psi_2'(-b) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \beta b & \frac{1}{\beta} \sin \beta b \\ -\beta \sin \beta b & \cos \beta b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_2(-b) \\ \psi_2'(-b) \end{bmatrix} = S_2^{-1} \begin{bmatrix} \psi_2(-b) \\ \psi_2'(-b) \end{bmatrix} \qquad (12.14)$$

وبحل هذه المعادلة بالنسبة الى $\psi_2(0)$ و $\psi_2'(0)$ نجد

$$\begin{bmatrix}\psi_2(0)\\ \psi_2'(0)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\cos\beta b & \frac{1}{\beta}\sin\beta b\\ -\beta\sin\beta b & \cos\beta b\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\psi_2(-b)\\ \psi_2'(-b)\end{bmatrix} = S_2\begin{bmatrix}\psi_2(-b)\\ \psi_2'(-b)\end{bmatrix} \quad (12.15)$$

أما المعادلة (12.12) فتكتب بالشكل

$$\begin{bmatrix}\psi_1(a)\\ \psi_1'(a)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\cos\alpha a & \frac{1}{\alpha}\sin\alpha a\\ -\alpha\sin\alpha a & \cos\alpha a\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\psi_1(0)\\ \psi_1'(0)\end{bmatrix} = S_1\begin{bmatrix}\psi_1(0)\\ \psi_1'(0)\end{bmatrix} \quad (12.16)$$

وبسبب استمرار ψ ومشتقه عند $x = 0$ نجد من (12.16) و (12.15) أن

$$\begin{bmatrix}\psi_1(a)\\ \psi_1'(a)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\cos\alpha a & \frac{1}{\alpha}\sin\alpha a\\ -\alpha\sin\alpha a & \cos\alpha a\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos\beta b & \frac{1}{\beta}\sin\beta b\\ -\beta\sin\beta b & \cos\beta b\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\psi_2(-b)\\ \psi_2'(-b)\end{bmatrix} \quad (12.17)$$

(12.18)

$$\begin{bmatrix}\cos\alpha a\cos\beta b - \frac{\alpha}{\beta}\sin\alpha a\sin\beta b & \frac{1}{\beta}\cos\alpha a\sin\beta b + \frac{1}{\alpha}\sin\alpha a\cos\beta b\\ -\alpha\sin\alpha a\cos\beta b - \beta\cos\alpha a\sin\beta b & -\frac{\alpha}{\beta}\sin\alpha a\sin\beta b + \cos\alpha a\cos\beta b\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\psi_2(-b)\\ \psi_2'(-b)\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}b_{11} & b_{12}\\ b_{21} & b_{22}\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}\psi_2(-b)\\ \psi_2'(-b)\end{bmatrix} = S\begin{bmatrix}\psi_2(-b)\\ \psi_2'(-b)\end{bmatrix} \quad (12.19)$$

وبحسب شرط بلوخ يكون لدينا

$$\begin{bmatrix}\psi_1(a)\\ \psi_1'(a)\end{bmatrix} = e^{i(a+b)k}\begin{bmatrix}\psi_2(-b)\\ \psi_2'(-b)\end{bmatrix} \quad (12.20)$$

وبمقارنة (12.19) و (12.20) نجد ان

$$\left[S - e^{i(a+b)k}\right]\begin{bmatrix}\psi_2(-b)\\ \psi_2'(-b)\end{bmatrix} = 0 \quad (12.21)$$

من الواضح ان العمود $[\psi_2(-b)\ \ \psi_2'(-b)]^{\sim}$ لا يمكن ان يكون معدوما ، ونبرهن ذلك كما يلي : من المعادلتين (12.15) و (12.16) نجد ان

$$\det S_1 = \det S_2 = 1 \tag{12.22}$$

فاذا فرضنا موقتا ان العمود السابق معدوم كان الشعاع

$$\begin{bmatrix} \psi_2(0) \\ \psi_2'(0) \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \psi_1(0) \\ \psi_1'(0) \end{bmatrix} \quad \text{(بحسب الشرط الحدى 1)} \tag{12.23}$$

معدوما بحسب (12.15) وكانت الثوابت A و B و C و D معدومة بحسب (12.10) و (12.12) مما يؤدى الى انعدام التابع الموجي بأكمله .

ينتج اذن ان معين امثال المصفوفة في (12.21) يجب ان يكون معدوما

$$\begin{vmatrix} b_{11} - e^{i(a+b)k} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} - e^{i(a+b)k} \end{vmatrix} = 0 \tag{12.24}$$

لدينا الان

$$\det[b_{ij}] = \det S = \det S_1 \det S_2 = 1 \tag{12.25}$$

وبنشر المعين السابق نجد

$$e^{2i(a+b)k} - \text{trace}\, S \cdot e^{i(a+b)k} + 1 = 0 \tag{12.26}$$

وبحل هذه المعادلة بالنسبة الى $e^{i(a+b)k}$ نجد

$$e^{i(a+b)k} = \frac{1}{2}\,\text{trace}\, S \pm i\left[1 - \frac{1}{4}\,\text{trace}^2 S\right]^{1/2} \tag{12.27}$$

وبمطابقة القسمين التخيلي والحقيقي في هذه المعادلة نجد ان

$$\cos k(a+b) = \frac{1}{2}\,\text{trace}\, S \tag{12.28}$$

وبالاستفادة من عبارة δ المعطاة بالمعادلة (12.18) نجد ان

$$-\frac{\alpha^2+\beta^2}{2\alpha\beta}\,\text{Sin}\,\alpha a\,\text{Sin}\,\beta b+\text{Cos}\,\alpha a\,\text{Cos}\,\beta b=\text{Cos}\,k(a+b) \qquad (12.29)$$

في المجال $0<E<V_0$ للطاقة يكون لـ β المعرفة بالعلاقة (12.8) قيمة تخيلية صرف ، وبوضع

$$\beta = i\gamma \qquad (12.30)$$

وملاحظة ان $\text{Cos}\,ix=\text{Ch}\,x$ و $\text{Sin}\,x = i\,\text{Sh}\,x$ نجد ان (12.29) تكتب بالشكل

$$\frac{\gamma^2-\alpha^2}{2\alpha\gamma}\,\text{Sh}\,\gamma b\,\text{Sin}\,\alpha a+\text{Ch}\,\gamma b\,\text{Cos}\,\alpha a=\text{Cos}\,k(a+b) \qquad (12.31)$$

حيث ان γ كمية حقيقية موجبة في المجال $(0<E<V_0)$ تماما كما هي حال β في المجال ($V_0<E<\infty$) وبناء على هذا فان نستعمل العلاقة (12.29) من اجل $(V_0<E<\infty)$ والعلاقة (12.29) من اجل ($0<E<V_0$) .

يجب ان نلاحظ ان التابع الموجي ψ ، وله طبعا بحسب نظرية بلوخ الشكل

$$\psi(x) = e^{ikx}\,u(x) \qquad (12.32)$$

يجب ان يكون محدودا حيثما كان . وبما ان (u (x تابع دوري ودوره مساو لـ ($a+b$) لذلك يبقى هذا التابع محدودا وقيمه عند اللانهاية هي نسخة طبق الاصل لقيمه في احدى الخلايا البلورية . اما التابع e^{ikx} فيبقى محدودا عند اللانهاية اذا وفقط اذا كانت الكمية k حقيقية . فلو كانت k تخيلية لتباعد e^{ikx} عند $-\infty$ أو عند $+\infty$ ، ولكان التابع الموجي (12.32) متباعدا ايضا عند احدى اللانهايتين وهو غير مقبول فيزيائيا . بناء على هذا نقبل توابع موجية من الشكل (12.32) فقط من اجل قيم حقيقية لـ k . يتألف الطرف الايسر في كل من العبارتين (12.29) و(12.31) من تابع من الشكل

$$K_1\,\text{Sin}\,\alpha a + K_2\,\text{Cos}\,\alpha a \qquad (12.33)$$

وهو يجب ان يساوي $\text{Cos}\,k(a+b)$. اذا كانت قيمة الطرف الايسر ، من اجل قيمة معطاة للطاقة ، اصغر بالقيمة المطلقة من الواحد ، فعندئذ يأخذ الطرف الايمن

هذه القيمة ايضا من اجل قيمة حقيقية لـ $k(a+b)$. اما اذا اخذ الطرف الايسر قيمة اكبر من الواحد بالقيمة المطلقة وذلك من اجل قيمة معطاة لـ E ، فان المساواة مع الطرف الايمن لا يمكن ان تتحقق الا من اجل قيم مركبة لـ k جزؤها التخيلي غير معدوم . ويؤدى هذا بدوره الى تباعد التابع الموجي عند اللانهاية . وبناء على هذا تكون القيم الاخيرة لطاقة الالكترون محظورة .

من الممكن ان نكتب الطرف الايسر في (12.29) و (12.31) بالشكل

$$K_3 \sin(\alpha a + \delta) \qquad (12.34)$$

حيث ان

$$K_3 = (K_1^2 + K_2^2)^{1/2} , \quad \tan\delta = K_1 / K_2 \qquad (12.35)$$

وهكذا يصبح شكل العلاقتين المذكورتين كالتالي

$$\left[1 + \frac{(\alpha^2-\beta^2)^2}{4\alpha^2\beta^2} \sin^2 \beta b\right]^{1/2} \cos(\alpha a - \delta) = \cos k(a+b) \qquad (12.36)$$

حيث

$$\tan\delta = -\frac{\alpha^2+\beta^2}{2\alpha\beta} \tan\beta b \qquad (V_0 < E < \infty) \qquad (12.37)$$

و

$$\left[1 + \frac{(\alpha^2+\gamma^2)}{4\alpha^2\gamma^2} sh^2 \gamma b\right]^{1/2} \cos(\alpha a - b) = \cos k(a+b) \qquad (12.38)$$

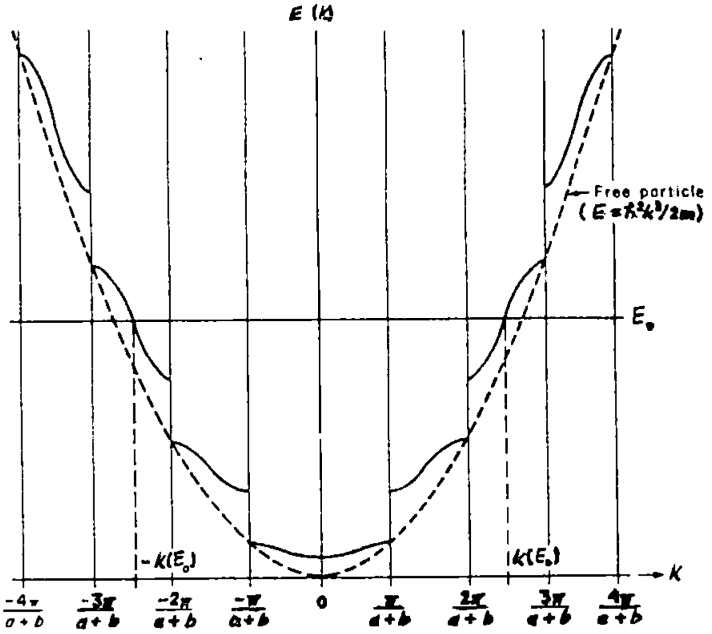
حيث ان

$$\tan\delta = \frac{\alpha^2+\gamma^2}{2\alpha\gamma} th\,\gamma b \qquad (0 < E < V_0) \qquad (12.39)$$

ويتضح من هذين الشكلين ان للطرف الايسر شكل تابع تجيبي مضروبا بعامل معدّل قيمته اكبر من الواحد دوما . ويأخذ هذا العامل المعدّل قيمته العظمى من اجل $\alpha = 0$ (أى من اجل $E = 0$) ويقترب من الواحد من اجل قيم كبيرة للطاقة ، حيث

يكون $\alpha \sim \beta$.

QUANTUM THEORY



The energy E plotted as a function of k

(ش . 8)

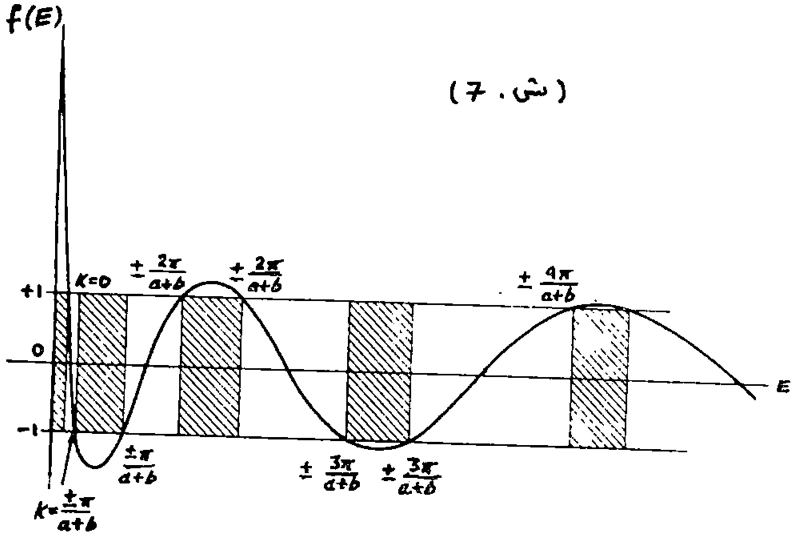
يظهر الشكل (ش . 7) تمثيلا بيانيا للطرف الا يسر في كل من (12.36) و (12.38) كتابع في الطاقة ،وبهذا الخصوص ننوه ان

$$\alpha^2 - \beta^2 = \alpha^2 + \gamma^2 = 2mV_0/\hbar^2 = const$$

عند ما يكون ترتيب المنحني واقع في المجال $[-1,+1]$ ، توجد قيمة حقيقية ل k تقابل تابعا موجيا مقبولا . وخارج هذا المجال تكون قيمة k مركبة ذات جزء تخيلي غير معدوم ،ولا تقود هذه القيم الى توابع موجية مقبولة فيزيائيا . وتكون بالتالي مجالات الطاقة الموافقة لقيم كهذه محظورة وتبينها المناطق المخططة في الشكل وهكذا تتشكل مناطق متناوبة من مناطق مسموح بها للقيم الخاصة للطاقة ومناطق محظورة عليها . تسمى هذه المناطق على الترتيب عصابات مسموحة وعصابات محظورة .
ان تجمع سويات طاقة الالكترون في عصابات مسموح بها هي من اهم الخواص المميزة

لسلوك الالكترون في الشبكات الدورية . ويمكن البرهان ان عصابات للطاقة تتصف بالخواص المذكورة سابقا تظهر دوما عندما يكون الكمون دوريا وبصرف النظر عن شكله .

باستعمال (12.36) و (12.38)و (12.5)و (12.8) يمكن ان نرسم منحنيا يظهر تغيرات E كتابع في k . يظهر الشكل الناتج (ش . 8) عصابات الطاقة المحظورة وعلاقة E ب k ضمن مختلف العصابات المسموحة . يظهر الشكل ايضا انه التابع ($E(k)$ يقترب من العلاقة المميزة لطاقة الالكترون الحر $E = \hbar^2k^2/2m$ والمرسومة بالخط المنقط . وكذلك ومن اجل طاقات كبيرة تصبح العصابات المسموحة عريضة جدا على حين تضيق العصابات المحظورة . وفي كل الاحوال يكون ميل المنحني ($E(k)$ معدوما عند اطراف العصابات المسموحة ، أي من اجل القيم $k = n\pi/(a+b)$ حيث n عدد صحيح . ويمكن برهان هذه النتيجة باشتقاق مباشر للعلاقتين (12.36) و (12.38) . ان خواص المنحني ($E(k)$ عامة ويمكن البرهان انها نفسها في حالة الابعاد الثلاثة وانها مستقلة عن الشكل الرياضي الصريح لتابع الكمون الدوري .



(ش . 7)

الفصل السادس

الهزاز البسيط التوافقي

من أمثلة مسائل الحالات المغلقة مسألة الهزاز التوافقي البسيط . ولهذه المسألة اهمية فائقة في ميكانيك الكم تماثل اهميتها في الميكانيك الكلاسيكي . تحدث الحركة التوافقية عندما تهتز جملة ما حول وضع التوازن ، وقد تكون الجملة جسما معلقا بنابض او يطفو على سطح الماء أو جزيء ثنائي الذرة ، أو ذرة في شبكة بلورية. يشترط في حدوث الحركة التوافقية نشوء قوة مرجعة تعيد الجملة الى وضع التوازن عندما يختل هذا التوازن ، ولكن عطالة الجملة المعتبرة تجعلها تتجاوز وضع التوازن ، وهكذا تهتز الجملة دون حد اذا لم تكن هنالك طاقة مبددة . في الميكانيك الكلاسيكي اذن لا يمكن الجملة أن تتحرر من مركز الجذب مهما تكن طاقتها الحركية ، وبذلك تكون حالاتها كافة حالات مغلقة ، ونتوقع من ثم ان تكون طاقتها مكممة .

١ § ـ دراسة كلاسيكية موجزة

تتناسب القوة المرجعة في الحركة التوافقية البسيطة طردا مع مقدار الازاحة r عن وضع التوازن . وفي حالة البعد الواحد x نكتب :

$$F = -kx = -m\omega^2 x \qquad (1.1)$$

تدعى هذه العلاقة قانون هوك ، ويسمى k ثابت هوك . بحسب قانون التحريك الثاني نجد :

$$-kx = m\ddot{x}$$

$$\Rightarrow x = a\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}\,t+\varphi\right) \qquad (1.2)$$

حيث ان φ فرق الطور و a سعة الحركة . يساوى نبض الحركة ω بحسب العلاقة الأخيرة $\sqrt{k/m}$ ، ولهذا عوضنا k في قانون هوك بالكمية $m\omega^2$.

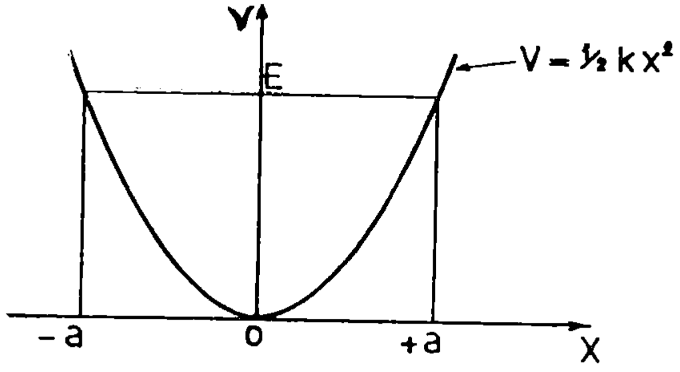
يعتبر قانون هوك تبسيطا مبالغافيه لقوى الطبيعة على حقيقتها . وبالفعل فمن النادر جدا ان تطيع القوى المرجعة قانون هوك . ولكن اهمية قانون هوك ، ومن ثمّ الهزاز التوافقي يعود الى أن معظم القوى المرجعة تُختزل الى قانون هوك من أجل إزاحة صغيرة . ولكي نرى هذا نلاحظ ان أية قوة تتبع الازاحة x ، يمكن نشرها وفق ماكلوران

$$F(x) = F(0) + xF'(0) + \frac{x^2}{2!}F''(0) + \cdots \qquad (1.3)$$

وبما ان $x=0$ هو وضع التوازن اذن $F(0)=0$ ومن اجل قيمة صغيرة لـ x يمكن اهمال الحدود في x^2 و x^3 و . . . بالمقارنة مع الحد في x . واستنادا الى ذلك نجد ان

$$F(x) = F'(0).x \qquad (1.4)$$

وهو ليس سوى قانون هوك عند ما يكون $F'(0)$ سالباً (من الواضح ان $F'(0)$ سالب في حالة القوى المرجعة) . سوف ندرس في بحث لاحق الهزاز غير التوافقي حيث تتعلق القوى المرجعة فيه بقوى اعلى من x .



(ش ١٠)

تُشتَق القوة المرجعة (1.1) من الكمون

$$V(x) = -\int_0^x F(x)\,dx = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \qquad (1.5)$$

المرسوم في (ش ١٠) . اذا كانت E طاقة الهزاز فان الجسيم يهتز بين الموضعين $x = -a$ و $x = +a$ حيث ترتبط E و a بالعلاقة $E = \frac{1}{2} m\omega^2 a^2$ ، وتزداد سعة الحركة بازدياد الطاقة E ، ولكن الحالة الموافقة لـ E مهما تكن قيمة هذه الاخيرة هي مغلقة حتما .

نتوقع من خبرتنا الكوانتية السابقة في الحالات المغلقة اجراء التعديلات التالية على الوصف الكلاسيكي :

١- لن يكون هنالك طيف مستمر وانما طيف منقطع .

٢- لن تكون الطاقة الدنيا $E = 0$ ، بل تأخذ قيمة محددة موجبة تماما .

٣- ثمة احتمال في نفاذ الجسيم عبر بئر الكمون المبين في (ش ١٠) والذهاب الى ماوراء $\pm a$.

§ 2 ـ تكميم الهزاز التوافقي :

بملاحظة ان الطاقة الكامنة للهزاز معطاة بالعلاقة (1.5) ، تأخذ معادلة شرودنجر الشكل

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right)\psi = 0 \qquad (2.1)$$

لنضع

$$\lambda = 2E/\hbar\omega \quad , \quad y = (m\omega/\hbar)^{1/2}\, x \qquad (2.2)$$

ولنستعمل الرمز ψ نفسه للتعبير عن التابع الموجي بدلالة y ، فتصبح المعادلة (2.1) على الشكل

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + (\lambda - y^2)\psi = 0 \qquad (2.3)$$

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + (\lambda - y^2)\psi = 0 \tag{2.3}$$

ولحل هذه المعادلة نُجري تغييراً في المتحول التابعي ψ معطى بالعلاقة

$$\psi = H_n e^{-y^2/2} \tag{2.4}$$

فنجد أن $\hat{H}_n$ يجب ان يحقق المعادلة

$$\frac{d^2H_n}{dy^2} - 2y\frac{dH_n}{dy} + (\lambda - 1)H_n = 0 \tag{2.5}$$

نبحث عن حل لهذه المعادلة على شكل كثير حدود ، ولذلك نضع

$$H_n = \sum_{k=0}^{n} a_k y^k \tag{2.6}$$

وبتعويض هذه العبارة ل H_n في (2.5) نجد

$$\sum_{k=2}^{n} k(k-1)a_k y^{k-2} - \sum_{k=0}^{n} 2k a_k y^k + (\lambda-1)\sum_{k=0}^{n} a_k y^k = 0 \tag{2.7}$$

وباستبدال $(k+2)$ ب k في المجموع الأول وملاحظة أن $a_{n+2} = a_{n+1} = 0$ ، نجد

$$\sum_{k=0}^{n} \{(k+1)(k+2)a_{k+2} - (2k-\lambda+1)a_k\} y^k = 0 \tag{2.8}$$

ولكي يكون $H_n(y)$ حلا للمعادلة (2.5) يجب ان تتحقق (2.8) مطابقة في y ، أي يجب ان تنعدم امثال y^k كافة ، وعليه نجد

$$(k+1)(k+2)a_{k+2} - (2k-\lambda+1)a_k = 0$$

$$\Rightarrow a_{k+2} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)} a_k \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \tag{2.9}$$

نرى من هذه العلاقة ان a_1 و a_0 كيفيتان ، وأن امثال الحدود الزوجية تعطى جميعها بدلالة a_0 ، على حين تعطى امثال الحدود الفردية جميعا بدلالة a_1 . لكن قد تؤدي العلاقة التدرجية (2.9) الى سلسلة غير منتهية اذا لم يمكن قطعها عند حد معين ، وبعبارة ثانية اذا لم تنعدم الصورة $(2k+1-\lambda)$ في الطرف الايمن للعلاقة التدرجية من اجل قيمة ما لـ k ولتكن n مثلا ، فان السلسلة لا تنتهي . اذن لكي تؤدى (2.9) بالنتيجة الى كثير حدود منته يجب ان يكون

$$\lambda = 2n+1 \tag{2.10}$$

حيث إن n عدد صحيح موجب كيفي . وبهذا تصبح علاقة التدرج (2.9) بالشكل

$$a_{k+2} = \frac{2(k-n)\,a_k}{(k+1)(k+2)} \tag{2.11}$$

نجد من العلاقة (2.2) التي تعرّف λ ان قيم E المسموح بها هي

$$E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega \qquad n=0,1,2,\dots \tag{2.12}$$

اذن فطاقة الهزاز التواقعي مكممة ، وتفصل بين كل سوية واخرى قفزة قدرها $\hbar\omega$ (أو $h\nu$) . عندما تكون $n=0$ تكون الطاقة الدنيا التي يأخذها الهزاز مساوية الى $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$. تُسمى هذه الطاقة ايضا طاقة الدرجة صفر ، ذلك لأنه عندما يتوازن الهزاز التوافقي مع محيطه فان طاقته تقترب من القيمة $E = E_0$ (وليس من $E = 0$) عندما تقترب درجة الحرارة من الصفر المطلق .

تُعتبر عبارة سويات الطاقة (2.12) من اهم العبارات في ميكانيك الكم ، وهي تبرر تفسير بلانك لاشعاع الجسم الأسود ، هذا التفسير الذى يعتبر بلانك المادة بموجبه مجموعة من الهزازات التوافقية يمتص او يصدر كل منها كماً (كوانتوم) من الطاقة يتناسب مع تواتره : $\Delta E = h\nu$. تحدد العبارة (2.12) مقدار التبادل في

الطاقة بين الاشعاع والمادة بواحدات من $h\nu$ ، وهي ليست سوى فرضية بلانك .

يجب ان نلاحظ ان الشرط (2.10) يؤدي اما الى قطع الحدود الفردية في السلسلة المعرفة بالعلاقة التدرجية (2.11) على حين يترك الحدود الزوجية دون قطع لتؤلف سلسلة غير منتهية ، او العكس بالعكس . ولكي نضمن ان علاقة التدرج (2.11) تولد فعلا كثير حدود منتهية، نضيف اليها شرطاً مساعداً :

$$a_0 = 0 \quad \text{من اجل } n \text{ فردي}$$
$$a_1 = 0 \quad \text{من اجل } n \text{ زوجي} \qquad (2.13)$$

§ 3 . التوابع الخاصة لطاقة الهزاز

باستعمال الشرط المساعد (2.13) نرى ان التوابع الخاصة للطاقة تُعطى بالعلاقة (2.4) حيث يُولّد فيها H_n بعلاقة التدرج (2.11) . ونكتب فيما يلي التوابع الموجية الخاصة الثلاثة الاولى :

$$\psi_0(y) = a_0 e^{-y^2/2} = A_0 e^{-y^2/2}$$

$$\psi_1(y) = a_1 y\, e^{-y^2/2} = A_1 2y\, e^{-y^2/2} \qquad (3.1)$$

$$\psi_2(y) = a_0(1-2y^2)\, e^{-y^2/2} = A_2(4y^2-2)\, e^{-y^2/2}$$

يتألف التابع الموجي من كثير حدود $H_n(y)$ في قوى y الفردية او الزوجية ويدعى كثير حدود هرميت وتابع اسي $Exp(-y^2/2)$ وثابت ضرب A_n . تُعيّن ثوابت الضرب A_n بشكل يصبح فيه التابع الموجي مستنظما ، وهي من اجل التوابع الموجية الثلاثة الاولى

$$A_0 = \pi^{-1/4} \quad , \quad A_1 = (4\pi)^{-1/4} \quad , \quad A_2 = (64\pi)^{-1/4}$$

تُعطى التوابع المستنظمة $\psi_n(y)$ بالعلاقة

$$\psi_n(y) = \pi^{-1/4}\ 2^{-n/2}\ (n!)^{-1/2}\ H_n(y)\ e^{-y^2/2} \tag{3.2}$$

يمكن توليد كثيرات حدود هرميت $H_n(y)$ بصيغة رود ريغ التي يمكن اتخاذها تعريفا لـ $H_n(y)$

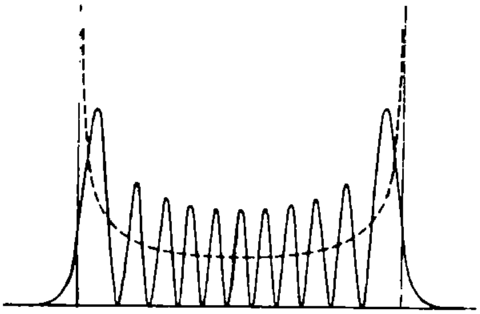
$$H_n(y) = (-1)^n\ e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \tag{3.3}$$

ان التوابع الخاصة (3.2) متعامدة مثنى مثنى لأنها حلول لمعادلة شرودنجر تقابل قيما خاصة مختلفة ، أي أن

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(y)\ \psi(y)\, dy = \delta_{nm} \tag{3.4}$$

يبين (ش . 2) اشكال التوابع الموجية الاولى . لاحظ ان هذه التوابع تتعقر نحو المحور x داخل المنطقة $|x| < (2E/m\omega^2)^{1/2}$ ، وبعيدا عنه خارج هذا المجال . لاحظ ايضا انه من اجل قيم كبيرة لـ n يبدو التابع الموجي كموجة مستقرة ذات عقد وبطون . ولذلك يمكن للمرء ان يتصوره وكأنه ينعكس جيئة وذهابا بين جداري البئر الكموني للهزاز .

يجب ان نلاحظ ايضا انه من اجل قيم كبيرة لـ n ترتفع الكثافة الاحتمالية الى اكبر قيمها في جوار $|x| = (2E/m\omega)^{1/2}$. ويتفق هذا مع النتيجة الكلاسيكية التي تقضي بأن الجسيم يوجد على الغالب على مقربة من نهايتي ترجحه ، حيث تكون سرعته معدومة . وبالحقيقة ومن وجهة نظر الميكانيك الكلاسيكي تتناسب كثافة الاحتمال عكساً مع سرعة الجسيم . يظهر الشكل (ش . 3) كثافة الاحتمال $|\psi_n|^2$ مقارنة مع كثافته الاحتمالية الكلاسيكية المبينة بالخط المنقط . لاحظ ان كثافة الاحتمال الكلاسيكية تكون صفرى عند $x = 0$ حيث تكون سرعة الجسيم عظمى .



(شـ . ٣)

ان وجود العقد في التوزع الاحتمالي $|\psi_n|^2$ يشكل مأزقا ، اذا ماحاولنا تفسيره وفقا للمفاهيم الكلاسيكية . فاذا كانت هذه المفاهيم صحيحة ،كان على الجسيم ان يتحرك عبر كل عقدة بسرعة غير متناهية ، والا لكان احتمال وجوده عند العقدة غير معدوم . وهكذا يظهر لدينا من جديد ان التصور القائم على اساس الجسيم المتمركز كنقطة مادية في الفراغ هو تصور ناقص .

§ ٤ - تماثل حالات الهزاز التوافقي

نلاحظ ان كل حالات الهزاز التوافقي هي اما متناظرة واما ضد متناظرة. بالحقيقة ان كل الحالات الزوجية متناظرة وكل الحالات الفردية ضد متناظرة.

بشكل عام ومن اجل جميع الجمل التي يكون فيها الكمون متناظرا حول المبدأ $V(x) = V(-x)$ نجد انه اذا كان $\psi(x)$ حلا لمعادلة شرودنجر :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\,\psi(x) \qquad (4.1)$$

فان $\psi(-x)$ يكون حلا لها ايضا . اذا كانت القيمة الخاصة E غير متحللة كان الحلان $\psi(x)$ و $\psi(-x)$ مرتبطين خطيا

$$\psi(x) = \epsilon\,\psi(-x) \qquad (4.2)$$

وباستبدال x ب $-x$ في هذه المعادلة نجد أن :

$$\psi(-x) = \epsilon\,\psi(x)$$

وهذا يقتضي أن

$$\psi(x) = \epsilon^2\,\psi(x) \Rightarrow \epsilon = \pm 1 \qquad (4.2)$$

يسمى ϵ تماثل الحالة . من أجل الحالات ذات التماثل الموجب $(\epsilon = 1)$ يكون $\psi(x)$ متناظرا حول المبدأ $(\psi(x) = \psi(-x))$ ، ومن أجل تلك ذات التماثل السالب $(\epsilon = -1)$ يكون $\psi(x)$ ضد متناظر حول المبدأ $(\psi(x) = -\psi(-x))$.

لنفرض أن E متحللة وان $\psi(x)$ حل ليس له تماثل محدد للمعادلة (4.1) التي فيها $V(x) = V(-x)$ عندئذ يكون كل تركيب خطي في $\psi(x)$ و $\psi(-x)$ حل للمعادلة (4.1) يقابل E ايضا . يمكن ان ننشىء من $\psi(x)$ و $\psi(-x)$ وكل منهما عديم التماثل ، حلين مستقلين خطيا لكل منهما تماثل محدد . وبالفعل نرى ان التابعين

$$\psi_S = \frac{1}{2}\psi(x) + \frac{1}{2}\psi(-x) \qquad (4.3)$$

$$\psi_A = \frac{1}{2}\psi(x) - \frac{1}{2}\psi(-x) \qquad (4.4)$$

حلان خاصان ل (4.2) يقابل كل منهما E وتماثلهما على الترتيب هما $+1$ و -1 .
ينتج من هذا انه عندما يكون V متناظرا المبدأ O فانه يمكن ودون الاخلال بسمة العمومية ، الاقتصار على التوابع الخاصة ذات التماثل المحدد الزوجية اوالفردية فقط .

§4. تمارين :

1. استنتج التابع الموجي ψ_4 بدءاً من الصيغة (2.11)

الحل : لتكن a_0 كيفية ولنضع $a_1 = 0$ ، فتكون جميع الامثال الفردية معدومة ، أما الامثال الزوجية فتحسب بدلالة a_0 من علاقة التدرج (2.11) التي نضع فيها $n=4$.

$$a_2 = \frac{2(0-4)}{1\cdot 2} a_0 = -4 a_0$$

$$a_4 = \frac{2(2-4)}{3\cdot 4} a_2 = -\frac{1}{3}(-4a_0) = \frac{4}{3} a_0$$

ويكون بحسب (2.6)

$$\psi_4 = (a_0 + a_2 y^2 + a_4 y^4)\, e^{-y^2/2}$$

$$= a_0(1 - 4y^2 + \frac{4}{3} y^4)\, e^{-y^2/2}$$

٢ . برهن ان التوابع الموجية (3.1) تكتب بدلالة x بعد الاستنظام بالشكل

$$\psi_0(x) = (\beta^2/\pi)^{1/4}\; e^{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2}$$

$$\psi_1(x) = \sqrt{2}\,\beta\,(\beta^2/\pi)^{1/4}\; x\, e^{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2} \qquad (5.1) \qquad , \beta = \sqrt{m\omega/\hbar}$$

$$\psi_2(x) = (\beta^2/8\pi)^{1/4}\;(1 - 2\beta^2 x^2)\, e^{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2}.$$

٣ . برهن بدءاً من (3.2) ان الشكل المستنظم للتوابع الموجية $\psi_n(x)$ هو

$$\psi_n(x) \quad 2^{-n/2}(n!)^{-1/2}(\beta^2/\pi)^{1/4} H_n(\beta x)\, exp(-\tfrac{1}{2}\beta^2 x^2) \qquad (5.2)$$

حيث ان

$$\beta = \sqrt{m\omega/\hbar}$$

٤ . استفد من صيغة رودريغ (3.3) لاستنتاج كثيرات حدود هرميت المعطاة في الجدول التالي والذى يبين قيم الطاقة الموافقة لها ايضا :

n	$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} (e^{-y^2})^{(n)}$	λ_n	$E_n = \frac{1}{2} \hbar\omega \lambda_n$
0	1	1	$\frac{1}{2} \hbar\omega$
1	$2y$	3	$\frac{3}{2} \hbar\omega$
2	$4y^2 - 2$	5	$\frac{5}{2} \hbar\omega$
3	$8y^3 - 12y$	7	$\frac{7}{2} \hbar\omega$
4	$16y^4 - 48y^2 + 12$	9	$\frac{9}{2} \hbar\omega$
5	$32y^5 - 160y^3 + 120y$	11	$\frac{11}{2} \hbar\omega$

٥ . برهن على تعامد ψ_n باجراء التكامل

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} H_n(y)\, H_m(y)\, dy$$

٦ . ماهو تماثل الحالة ψ_n للهزاز التوافقي .

٧ . لنفرض ان الهزاز التوافقي في حالته الدنيا ψ_0 . احسب القيم المتوقعة للملحوظات $\hat{x}$ و $\hat{x}^3$ و $\hat{P}_x$ و $\hat{P}_x^2$ و $\hat{H}$.

الجواب :

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^* x\, \psi_0\, dx = 0$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^* x^2 \psi_0\, dx = \hbar / 2m\omega$$

$$\langle \hat{P}_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^* \left(-i\hbar \frac{d\psi}{dx}\right) dx = 0$$

$$\langle \hat{P}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-\hbar^2 \frac{d^2\psi}{dx^2}\right) dx = \frac{1}{2} m\omega\hbar$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \left\langle \frac{1}{2m} P^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right\rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

§ A. حول كثيرات حدود هرميت :

سوف ندرس في هذا البحث حلول المعادلة (2.5)، المؤلفة من كثيرات حدود، عندما يكون الوسيط λ مساويا الى عدد صحيح موجب فردي ، أي $\lambda = 2n+1$.
بناء على هذا نكتب المعادلة التي هي قيد الدرس بالشكل

$$\frac{d^2 H_n}{dx^2} - 2y\frac{dH_n}{dy} + 2n H_n = 0 \tag{A.1}$$

وبوضع

$$H_n = e^{y^2} u \tag{A.2}$$

تصبح المعادلة

$$\frac{d^2 u}{dy^2} + 2y\frac{du}{dy} + 2(n+1)u = 0 \tag{A.3}$$

وبتغيير المتحول التابعي وفقا للعلاقة

$$u = \frac{d^n v}{dy^n} = v^{(n)} \tag{A.4}$$

تكتب المعادلة (A.3) على الشكل

$$v^{(n+2)} + 2y\, v^{(n+1)} + 2(n+1)\, v^{(n)} = 0 \tag{A.5}$$

وبحسب قاعدة ليبنز في الاشتقاق

$$\begin{aligned}(f(y)g(y))^{(n)} = f^{(n)} g^{(0)} + \binom{n}{1} f^{(n-1)} g^{(1)} + \binom{n}{2} f^{(n-2)} g^{(2)} \\ + \cdots + \binom{n}{n-1} f^{(1)} g^{(n-1)} + \binom{n}{n} f^{(0)} g^{(n)}\end{aligned} \tag{A.6}$$

حيث ان $\binom{n}{k} = n!/[k!(n-k)!]$، نرى أن المعادلة (A.5) تكتب على الصورة

$$\frac{d^{n+1}}{dy^{n+1}}(v' + 2yv) = 0 \qquad (A.7)$$

وأحد حلول هذه المعادلة هو وضوحا

$$v' + 2yv = 0 \qquad (A.8)$$

ونجد منه أن

$$v = Ae^{-y^2} \qquad (A.9)$$

حيث ان A ثابت ضرب كيفي . ينتج من (A.2) و (A.4) و (A.9)أن

$$H_n = Ae^{y^2}\frac{d^n}{dy^n}e^{-y^2} \qquad (A.10)$$

هو حل للمعادلة (A.1) ، وهذا الحل هو كثير حدود وضوحا . لقد بيّنا في 2 § أن للمعادلة (A.1) حل وحيد على شكل كثير حدود (بعد غض النظر عن ثابت ضرب كيفي) . اذن فالحل (A.10) هو حل خاص للمعادلة (A.1). باختيار A حيث تكون امثال y^n في هذا الحل مساوية الى 2^n نرى ان (A.10) تعين كثير حدود هرميت من المرتبة n ونرمز اليه بالرمز H_n ونرى ان $A = (-1)^n 2^n$ ، واستنادا الى هذا يكون

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2}\frac{d^n}{dy^n}e^{-y^2} \qquad (A.11)$$

تقود هذه النتيجة بصورة مباشرة الى تعيين التوابع المولدة لكثيرات حدود هرميت ، فاذا اخذنا $f(t) = e^{-t^2}$ ونشرنا $f(y-t)$ في جوار y بحسب تايلور في سلسلة قوى حصلنا على

$$e^{-(y-t)^2} = f(y-t)\Big|_{t=0} - tf'(y-t)\Big|_{t=0} + \dots + \frac{(-t)^n}{n!}f^{(n)}(y-t)\Big|_{t=0} + \dots$$

$$= f(y) - t f'(y) + \frac{t^2}{2!} f''(y) + \cdots + \frac{(-t)^n}{n!} f^{(n)}(y) + \cdots$$

وبحسب (A.11) يكون

$$f^{(n)}(y) = (e^{-y^2})^{(n)} = (-1)^n e^{-y^2} H_n(y)$$

واستنادا الى هذا نجد

$$e^{-(y-t)^2} = e^{-y^2} + t(2y e^{-y^2}) + \frac{t^2}{2!}(4y^2-2)e^{-y^2} + \cdots \tag{A.12}$$

$$= e^{-y^2}\{H_0(y) + t H_1(y) + \cdots + \frac{t^n}{n!} H_n(y) + \cdots\}$$

وبضرب الطرفين بالمقدار e^{y^2} نجد التابع المولد لكثيرات حدود هرميت

$$e^{-t^2+2yt} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(y) \frac{t^n}{n!} \tag{A.13}$$

بدءاً من التابع المولد (A.13) يمكن ان نحصل على علاقات التدرج التي تحققها كثيرات حدود هرميت . باشتقاق طرفي (A.13) بالنسبة الى y نجد

$$2t\, e^{-t^2+2yt} = \sum H'_n(y) \frac{t^n}{n!} \tag{A.14}$$

وبالاستفادة ثانية من عبارة التابع المولد (A.13) نجد

$$2t \sum_{n=0}^{\infty} H_n \frac{t^n}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} H'_n(y) \frac{t^n}{n!} \tag{A.15}$$

وبمطابقة امثال t^n في الطرفين نجد

$$H'_n(y) = 2n H_{n-1}(y) \tag{A.16}$$

وباشتقاق (A.13) بالنسبة الى t والتعبير عن الطرف الايسر بدلالة H_n نجد

$$(-2t+2y)\sum_{n=1}^{\infty} H_n \frac{t^n}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} H_n \frac{t^{n-1}}{(n-1)!}$$

وبمطابقة امثال t^n في الطرفين نجد

$$2y \frac{H_n}{n!} - 2\frac{H_{n-1}}{(n-1)!} = \frac{H_{n+1}}{n!}$$

$$\Rightarrow \quad H_{n+1} = 2y H_n - 2n H_{n-1} \qquad (A.17)$$

من العلاقة الاخيرة وبعد معرفة ان $H_0 = 1$ و $H_1 = 2y$ يمكن حساب كثيرات حدود هرميت كافة . بحذف H_{n-1} بين (A.16) و (A.17) نجد علاقة التدرج التالية

$$H_{n+1} = 2y H_n - H_n' \qquad (A.18)$$

ومن هذه العلاقة ايضا يمكن ان نبني كثيرات حدود هرميت كافة بدءاً من $H_0 = 1$.

لنعتبر التكامل

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} H_n(y) H_m(y)\, dy = (-1)^n \int_{-\infty}^{+\infty} H_m(y) \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}\, dy$$

وبمكاملة هذا التكامل بالتجزئة خطوة فخطوة ، نجد أن

$$I = (-1)^n \left\{ H_m(y) \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-y^2} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dH_m}{dy} \frac{d^{n-1}}{dy^{n-1}} e^{-y^2} dy \right\} \qquad (A.19)$$

ولكن الحد الأول في الطرف الايسر معدوم لأنه جداء كثير حدود بالتابع e^{-y^2} محسوبا عند $\pm\infty$ ، وبتكرار هذه العملية n مرة نرى ان الحد الواقع خارج التكامل في كل خطوة يكون معدوما بحسب المحاكمة السابقة . وتكون النتيجة

$$I = (-1)^{2n} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^n H_m}{dy^n} e^{-y^2}\, dy \qquad (A.20)$$

اذا كان $n \neq m$ فيمكن ان نفترض ، دون فقدان صفة العمومية ، وذلك بسبب تناظـــــر التكامل I في H_n و H_m ، يمكن ان نفترض ان $m < n$ ويكون في هذه الحالـــــة $d^n H_m / dx^n = 0$ ، وذلك لأنّ H_m كثير حدود من مرتبة m اصغر من n . نستنتج اذن ان التكامل I معدوم من أجل $n \neq m$. نعبر عن هذه الحقيقة بقولنـــا ان كثيرات حدود هرميت متعامدة بالنسبة للوزن e^{-y^2} . اما اذا كان $n = m$ فنجد أن

$$\frac{d^n H_m}{dy^n} = \frac{d^n}{dy^n}\left(2^n y^n + \text{حدود من مرتبة ادنى} \right) = 2^n \cdot n! \tag{A.21}$$

ويؤول التكامل الى

$$2^n \cdot n! \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy = 2^n \cdot n! \sqrt{\pi} \tag{A.22}$$

وبناء على ماسبق نجد

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} H_m(y) H_n(y)\, dy = 2^n \cdot n! \sqrt{\pi}\, \delta_{mn} \tag{A.23}$$

من السهل الآن استنظام $\Psi(x)$ المعطى ضمنا بالعلاقة (3.2). يصبح شرط الاستنظام

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x) \Psi_m(x)\, dx$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} A_n^2\, e^{-y^2/2} H_n(y) H_m(y)\, dy \tag{A.24}$$

وذلك بعد الاستفادة من المعادلة (2.2) :

$$x = \sqrt{\hbar/m\omega}\; y \tag{A.25}$$

وبالاستفادة من النتيجة (A.23) نجد

$$1 = A_n^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\; 2^n\; n!\; \pi^{1/2}$$

$$\Rightarrow A_n = (\hbar/m\omega)^{-1/4} \; 2^{-n/2} \; (n!)^{-1/2} \; \pi^{-1/4}$$

$$= (m\omega/\pi\hbar)^{1/4} \; 2^{-n/2} \; (n!)^{-1/2} \quad (A.26)$$

§6 . حساب قيم الطاقة للهزاز وتوابعه الخاصة بطرق جبرية

لقد قمنا في §2 بحل معادلة شرود نجر حلا مباشرا بقصد حساب القيم الخاصة والتوابع الخاصة لطاقة الهزاز التوافقي . وبالفعل وبشكل عام ، ومادام قد تم تمثيل موءثر $\hat{A}$ او جزء منه بموءثر تفاضلي فان الطريقة المألوفة في حساب توابعه وقيمه الخاصةهي حل المعادلةالتفاضلية $A\psi=\lambda\psi$.سنشرح الآن طريقة اخرى نجد وفقها قيم موءثر هاميلتون المتعلق بالهزاز التوافقي وتوابعه الخاصة ، دون ان نحل المعادلة الخاصة كمعادلة تفاضلية . سنرى انه باللجوء الى قواعد الجبر التجميعي وغير التبديلي الذى توءلفه الموءثرات ، يمكن اشتقاق قيم الطاقةوالتوابع الخاصة المقابلة كافة .

تركز الطريقة الجبرية على تحليل موءثر هاميلتون

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (6.1)$$

الى موءثرين مترافقين . ولذلك نبدأ بتعريف موءثرين غير هرميتيين

$$a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2m}} \hat{P} \pm i\sqrt{\frac{m}{2}}\, \omega \hat{x} \quad (6.2)$$

وهذا الموءثران هما المرافقان الهرميتيان لبعضهما بعضا . أى أنه

$$a_+^{\dagger} = a_- \quad , \; a_-^{\dagger} = a_+ \; . \quad (6.3)$$

وبضرب الموءثرين $\hat{a}_+$ و $\hat{a}_-$ ببعضهما بعضا بترتيبين مختلفين نجد العلاقة

$$\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2}\hbar\omega = \hat{a}_- \hat{a}_+ - \frac{1}{2}\hbar\omega = \hat{H} \quad (6.4)$$

التي نستنتج منها أن

$$[a_+ , a_-] = -\hbar\omega \quad (6.5)$$

$$[\hat{H}, \hat{a}_\pm] = \pm\hbar\omega\ \hat{a}_\pm \quad (6.6)$$

من ناحية فيزيائية يبدو من الجلي أن قيم الطاقة الممكنة للهزاز التوافقي يجب أن تكون موجبة ، لأن موءثر الطاقة هو مجموع حدين مربعين . ويمكن الوصول الى هذه النتيجة ايضا من خواص الموءثرات : ان قيم x حقيقية ومن ثم فالقيم التي يمكن أن يأخذها مربعها موجبة ، وكذلك بالنسبة الى مربع الدفع . وينتج اذن ان القيم المتوقعة للطاقتين الكامنة والحركية موجبة ، ولذلك نجد أن القيم المتوقعة للطاقة موجبة . ينتج من هذا ان القيم الخاصة للطاقة موجبة (ليس ثمة مايمنع في هذه المناقشة من أن يكون الصفر بين القيم المتوقعة أو القيم الخاصة) .

اعتمادا على فحوى الفقرة الأخيرة يجب أن يكون للطاقة حد أدنى . لنرمز للطاقة الدنيا التي يمكن أن يأخذها الهزاز بالرمز E_0 وللتابع الخاص المقابل بالرمز ψ_0 . تحقق هاتان الكميتان المعادلة الخاصة

$$\hat{H}\psi_0 = E_0\psi_0 \quad (6.7)$$

لا نعرف حتى الان اذا ماكان ψ_0 وحيدا ، أو بعبارة أخرى ، ماذا كانت E_0 غير متحللة . لنوءثر على طرفي (6.7) من الجهة اليسرى بالموءثر $\hat{a}_-$:

$$\hat{a}_- \hat{H}_0 \psi = E\ \hat{a}_- \psi_0 \quad (6.8)$$

بالاستفادة من احدى العلاقتين التبادليتين (6.6) نجد المعادلة

$$\hat{H}(\hat{a}_-\psi_0) = (E_0 - \hbar\omega)(\hat{a}_-\psi_0) \quad (6.9)$$

التي لها شكل معادلة خاصة ذات تابع خاص($\hat{a}_-\psi_0$) وقيمة خاصة ($E_0 - \hbar\omega$) . حيث ان E_0 هي قيمة الطاقة الدنيا ، اذن لا يمكن ان يمثل $\hat{a}_-\psi_0$ تابع حالة والا لكانت ($E_0 - \hbar\omega$) قيمة للطاقة أصغر من القيمة الدنيا E_0 . ينتج اذن أن (6.9) يمكن أن تتحقق فقط من أجل الحل التافه

$$\hat{a}_- \psi_0 = 0 \tag{6.10}$$

اذا أثرنا في هذه المعادلة من الجهة اليسرى بالمؤثر $\hat{a}_+$ وجدنا

$$a_+ a_- \psi_0 = 0$$

$$\Rightarrow (\hat{H} - \tfrac{1}{2}\hbar\omega)\psi_0 = 0 \qquad \text{(بحسب (6.4))}$$

$$\Rightarrow (E_0 - \tfrac{1}{2}\hbar\omega)\psi_0 = 0$$

$$\Rightarrow E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega \tag{6.11}$$

بطريقة مشابهة واذا أثرنا في (6.7) من الجهة اليسرى ب $\hat{a}_+$ واستفدنا من (6.4) وجدنا

$$\hat{H}(\hat{a}_+\psi_0) = (E_0 + \hbar\omega)(\hat{a}_+\psi_0) \tag{6.12}$$

نكرر عملية تأثير $\hat{a}_+$ في (6.12) مرة تلو أخرى ونستفيد كل مرة من (6.4)فنجد

$$H(\hat{a}_+^n \psi_0) = (E + n\hbar\omega)(\hat{a}_+^n \psi_0), \tag{6.13}$$

وهي معادلة خاصة تعطي مجموعة من التوابع الخاصة ومجموعة تقابلها من القيم الخاصة ل $\hat{H}$. تُعطى هاتان المجموعتان بالعلاقتين

$$\psi_n = c_n \hat{a}_+^n \psi_0 \quad , \; E_n = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega \tag{6.14}$$

حيث إن c_n ثوابت نختارها بحيث تكون ψ_n مستنظمة .

يسمى $\hat{a}_+$ مؤثر بناء و $\hat{a}_-$ مؤثر هدم . يقوم هذان المؤثران بنقل كل تابع خاص لمؤثر هاميلتون الى تابع خاص آخر يوافق قيمة للطاقة أعلى أو أخفض على الترتيب مولّدَين بذلك متتالية من القيم الخاصة .

لنكتب بصورة صريحة المعادلة (6.10)

$$d\psi_0/dx + (m\omega/\hbar)x\psi_0 = 0 \tag{6.15}$$

تقبل هذه المعادلة الحل

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-(m\omega/2\hbar)x^2} \tag{6.16}$$

ولقد اختير عامل الضرب الثابت كقيمة لثابت المكاملة من أجل أن يكون ψ_0 مستنظمـا .
نلاحظ أن الحل ψ_0 وحيد ومن ثم فان E_0 غير متحللة . نستنتج أيضا ان جميع

القيم الخاصة المعطاة ب (6.14) غير متحللة وأن جميع التوابع الخاصة المقابلة والمولدة ب a_+ وحيدة . اذا فرضنا موأقتا ان افادتنا الأخيرة غير صحيحة لأمكن بتطبيق a_- تباعا توليد تابع خاص متعلق ب E_0 مستقل عن ψ_0 . كذلك فالقيم الخاصة المعينة ب (6.14) هي جميع قيم الطاقة الممكنة ، فلو وجدت قيمة خاصة ليست معطاة ب (6.14) فان تطبيق $\hat{a}_-$ تباعا على التابع الخاص الموافق لهذه القيمة يقود الى حد ادنى لمجموعة القيم الخاصة يختلف عن ذاك المعطى ب (6.11)، وهذا غير صحيح لأنه قد تم اظهار وحدانية E_0 . بما ان الثوابت c_n تُختار بحيث تصبح التوابع الخاصة ψ_n كافة مستنظمة ، اذن

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 \qquad \forall \psi_n \tag{6.17}$$

ولكن

$$\psi_n = c_n \hat{a}_+^n \psi_0 = c_n a_+ (a_+^{n-1} \psi_0) \tag{6.18}$$

$$\psi_{n-1} = c_{n-1} a_+^{n-1} \psi_0 \tag{6.19}$$

بمقارنة العلاقتين السابقتين نجد

$$\psi_n = \frac{c_n}{c_{n+1}} a_+ \psi_{n-1} \tag{6.20}$$

وبحسب (6.17) يكون لدينا

$$\begin{aligned}
1 &= \left|\frac{c_n}{c_{n-1}}\right|^2 \langle a_+ \psi_{n-1} | a_+ \psi_{n-1} \rangle \\
&= \left|\frac{c_n}{c_{n-1}}\right|^2 \langle \psi_{n-1} | a_- a_+ \psi_{n-1} \rangle \\
&= \left|\frac{c_n}{c_{n-1}}\right|^2 \langle \psi_{n-1} | (H + \tfrac{1}{2}\hbar\omega) \psi_{n-1} \rangle \\
&= \left|\frac{c_n}{c_{n-1}}\right|^2 \langle \psi_{n-1} | n\hbar\omega\, \psi_{n-1} \rangle
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow |c_n|^2 = |c_{n-1}|^2 / n\hbar\omega \Rightarrow c_n = c_{n-1} / \sqrt{n\hbar\omega} \tag{6.21}$$

ومن السهولة بمكان آن نصل الان الى النتيجة التالية

$$c_0 = 1 \quad , \quad c_n = \left(\frac{1}{n!}\right)^{1/2} (1/\hbar\omega)^{n/2} . \qquad (6.22)$$

§ 7 الطرائق الجبرية والقيم المتوقعة

لنحسب مثلا القيمة المتوقعة للطاقة الحركية عندما يكون الهزاز في حالة ما . يمكن التحقق بسهولة أن

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 = \frac{1}{4}(\hat{a}_+^2 + \hat{a}_-^2) + \frac{1}{2}\hat{H} \qquad (7.1)$$

بفرض ان الهزاز في حالة خاصة ψ_n ، تكون القيمة المتوقعة

$$\langle T \rangle = \langle \psi_n | \frac{1}{4}(\hat{a}_+^2 + \hat{a}_-^2) + \frac{1}{2}\hat{H} | \psi_n \rangle \qquad (7.2)$$

لنحسب الطرف الأيمن حدا فحدا

$$\langle \psi_n | \frac{1}{4} a_+^2 \psi_n \rangle = \frac{1}{4}\frac{c_n}{c_{n+2}} \langle \psi_n | \psi_{n+2} \rangle = 0 \qquad (7.3)$$

$$\langle \psi_n | \frac{1}{4}\hat{a}_-^2 \psi_n \rangle = \langle \frac{1}{4}\hat{a}_+^2 \psi_n | \psi_n \rangle = 0 \qquad (7.4)$$

$$\langle \psi_n | \frac{1}{2} H \psi_n \rangle = \frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega \qquad (7.5)$$

اذن

$$\langle T \rangle_n = \langle \frac{1}{2} H \rangle_n = \frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega \qquad (7.6)$$

ان هذا يعني ان متوسط الطاقة الحركية للهزاز عندما يكون في حالة محددة (حالة خاصة للطاقة) يساوى نصف طاقته الكلية . يقابل هذا في الميكانيك الكلاسيكي أن متوسط الطاقة الحركية (متوسط زمني) للهزاز يساوى نصف طاقته الكلية . تمت معرفة النتيجة من أجل حالة محددة ومن المرغوب فيه أن نحسب القيمة المتوقعة عندما لا يكون الهزاز في حالة محددة للطاقة ولتكن

$$\psi = \sum_n c_n e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} \psi_n \qquad (7.7)$$

لدينا الان

$$\langle T \rangle = \langle \Psi | \frac{1}{2m} P^2 \Psi \rangle \tag{7.8}$$

$$= \sum_{n,k} c_n^* c_k \, e^{i(n-k)\omega t} \langle \Psi_n | \frac{1}{2m} P^2 \Psi_k \rangle$$

اذا أخذنا المتوسط الزمني فان التوابع الدورية تنعدم كلها من أجل $n \neq k$ ، مما يؤدى الى أن المتوسط الزمني للقيمة المتوقعة للطاقة الحركية

$$\langle \bar{T} \rangle = \sum_n |c_n|^2 \langle \Psi_n | \frac{1}{2m} P^2 \Psi_n \rangle \cdot \tag{7.9}$$

وبحسب (7.1) و (7.7) و(7.9)

$$\langle \bar{T} \rangle = \frac{1}{2} \sum_n |c_n|^2 \langle \Psi_n | H \Psi_n \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \langle \Psi | H \Psi \rangle = \frac{1}{2} \langle H \rangle \tag{7.10}$$

تطابق هذه النتيجة أيضا النتيجة الكلاسيكية القاضية بأن المتوسط الزمني للطاقة الحركية للهزاز تساوى نصف طاقته الكليـة .

تمرين : برهن على (7.9) بدءًا من (7.8) بأخذ متوسط الكمية $e^{i(n-k)\omega t}$ خلال دور واحد ▫

بطريقة مشابهة يمكن حساب القيمة المتوقعة لدفع الهزاز من أجل حالة محددة للطاقة . بملاحظة أن

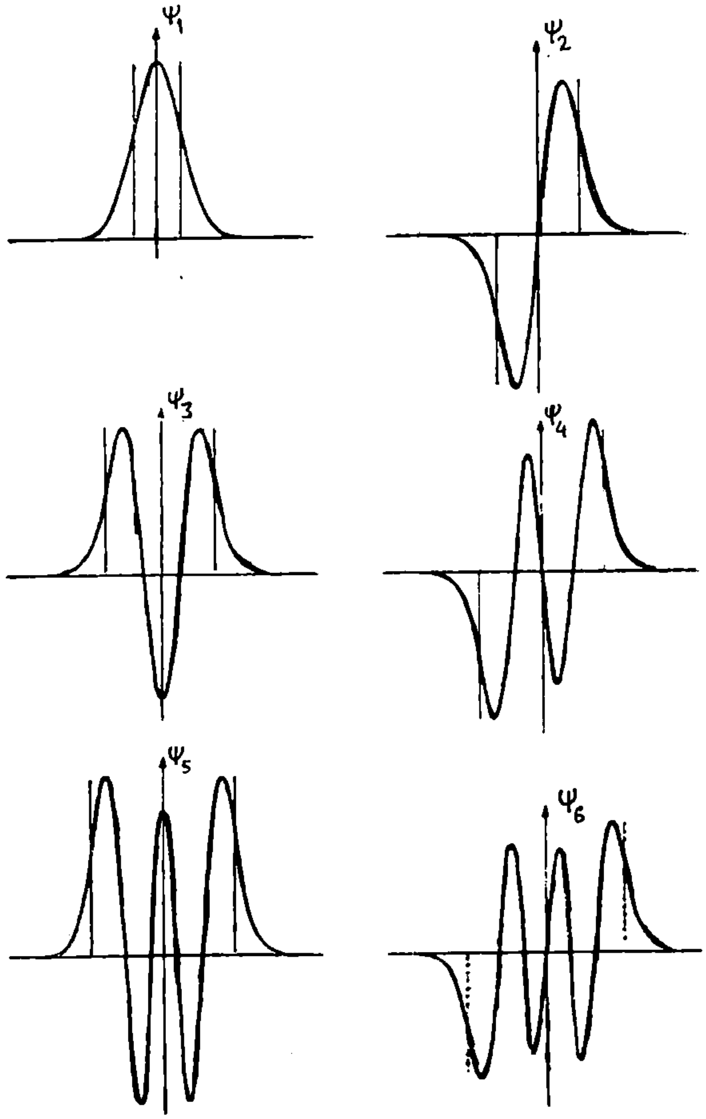
$$\hat{P} = \sqrt{\frac{m}{2}} \, (\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \tag{7.11}$$

نجد مايلي

$$\langle \hat{P} \rangle_n = 0 \tag{7.12}$$

يجب التأكيد على أن الطرائق المستعملة لمعرفة التوابع الخاصة والقيم المتوقعة لطاقة ودفع الهزاز هي في جوهرها جبرية ، وقد كانت المعادلة التفاضلية الوحيدة التي لجأنا الى حلّها هي (6.15) وهي معادلة بسيطة . أما التوابع الأخرى فقد

تمت معرفتها بطريقة موثرات البناء والهدم . يوءلف هذا موءشرا على أهمية الطرائق الجبرية في **ميكانيك** الكم . ولكن لسوء الحظ ليس ثمة مسائل كثيرة يمكن حلّها بطرائق جبرية صرف .



(ش . 2)

8§ التمثيل المصفوفي ـ $\hat{H}$ للهزاز التوافقي :

يؤلف مؤثر الطاقة $\hat{H}$ في الهزاز التوافقي الوحيد البعد بمفرده مجموعة فيزيائية عظمى من الملحوظات الفيزيائية . وبذلك يمكن ان نأخذ مجموعة اشعته الخاصة $\{\psi_n\}$ كمجموعة كاملة مستندة لتمثيل توابع الحالة ψ والملحوظات الفيزيائية المتعلقة بالجملة .

اذا كان ψ_k تابع خاص لمؤثر هاميلتون كان $\psi_k = \sum_n \psi_n \delta_{kn}$ ، ولذلك يمثل ψ_k بعمود جميع عناصره معدومة سوى العنصر ذو الرقم k (ونلفت الانتباه هنا الى أنا نرقم التوابع الخاصة في حالة الهزاز التوافقي بدءاً من الصفر) ، وهكذا نجد أن العمود الممثل لـ ψ_k هو

$$\psi_k = [0 \;\; 0 \;\; 0 \;\dots\; 0 \; 1 \; 0 \;\dots]^{\sim}$$

ونرمز به الى منقول هذا السطر . وهذا العمود غير منته من الادنى . يمثل تابع حالة ما

$$\psi = \sum_{k=0}^{\infty} \langle \psi_k | \psi \rangle \psi_k = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^* \psi \, dx \right) \psi_k$$

بعمود غير منته من الادنى

$$\psi = [\langle \psi_0 | \psi \rangle, \langle \psi_1 | \psi \rangle, \langle \psi_2 | \psi \rangle, \dots]^{\sim} \tag{8.3}$$

في التمثيل ـ H تكون المصفوفة $[\hat{H}]$ قطرية تتألف عناصر قطرها من مختلف القيم الخاصة لـ $\hat{H}$. اذن

$$[\hat{H}] = \hbar\omega \begin{bmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3/2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 5/2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 7/2 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{8.4}$$

وبالفعل فعناصر المصفوفة $[\hat{H}]$ تُعطى بالعلاقة

$$H_{kn} = \langle \psi_k | \hat{H} \psi_n \rangle = \langle \psi_k | (n+\tfrac{1}{2}) \hbar\omega \, \psi_n \rangle \tag{8.5}$$

$$= (n+\tfrac{1}{2}) \hbar\omega \langle \psi_k | \psi_n \rangle = (n+\tfrac{1}{2}) \hbar\omega \, \delta_{kn}$$

أما بالنسبة الى موئثر البناء a_+ فنرى ان عناصر مصفوفته $[a_+]$ تتعين كالمعتاد بالعلاقة

$$a_{+kn} = \langle \psi_k | a_+ \psi_n \rangle \tag{8.6}$$

$$= \langle \psi_k | \frac{c_n}{c_{n+1}} \psi_{n+1} \rangle \quad (\text{بحسب } (6.20))$$

$$= \sqrt{n+1}\sqrt{\hbar\omega}\, \delta_{k,n+1} \quad (\text{بحسب } (6.21))$$

وبذلك نجـــد

$$[a_+] = \sqrt{\hbar\omega} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \tag{8.7}$$

ويمثل $\hat{a}_-$، المرافق الهرميتي لـ $\hat{a}_+$، بمصفوفة $[\hat{a}_-]$، وترتبط المصفوفتان الممثلتان لهذين الملحوظين كما رأينا في بحث الموئثرات بالعلاقة

$$[a_-] = [a_+^\dagger] = [a_+]^\dagger = [a_+]^{\tilde{*}} \tag{8.8}$$

أى اننا نحصل على المصفوفة $[a_-]$ بدءاً من $[a_+]$ بأخذ منقول الاخيرة ثم اخـــذ المرافق العقدى لها . وهكذا نجد أن

$$a_{-kn} = \tilde{a}^*_{+kn} = a^*_{+nk} \tag{8.9}$$

$$= \sqrt{k+1}\sqrt{\hbar\omega}\, \delta_{n,k+1} = \sqrt{n\hbar\omega}\, \delta_{n,k+1}$$

ومن ثم يكـــون

$$(8.10) \qquad [a_-] = \sqrt{\hbar\omega}\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \end{bmatrix}$$

ويمكن الآن حساب المصفوفة $[\hat{H}]$ من العلاقة (6.4) بعد الاستفادة من (8.7) و (8.10) . وتنطبق النتيجة طبعا مع (8.9) .

تتعين عناصر المصفوفة $[x]$ بالعلاقة

$$(8.11) \qquad x_{kn} = \langle \psi_k | x\psi_n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^* x \psi_n \, dx$$

$$= A_k A_n \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-y^2} H_k(y) H_n(y) \, dx$$

وبالتعويض من أجل x من (2.2) ومن أجل A_k و A_n من (A.26) نجد

$$(8.12) \qquad x_{kn} = (2^{k+n} k! \, n! \; m\omega/\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} y e^{-y^2} H_k(y) H_n(y) \, dy$$

وبحسب (A.17) نجد

$$(8.13) \qquad 2yH_n = H_{n+1} + 2H_{n-1}$$

وبالاستفادة من شرط التعامد (A.23) ، تعطي المعادلة (8.12) النتائج

$$(8.14) \qquad x_{n,n-1} = x_{n-1,n} = (\hbar/2m\omega)^{1/2} \; n^{1/2}$$

حيث ان $n = 1, 2, 3, \ldots$. اما باقي العناصر فهي معدومة . اذن

$$(8.15) \qquad [x] = (\hbar/2m\omega)^{1/2}\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}$$

تُعطى عناصر المصفوفة الممثلة للدفع $\hat{p}$ بالعلاقة

$$\hat{P}_{kn} = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^* \frac{d\psi_n}{dx} dx \qquad (8.16)$$

وباشتقاق ψ_n والاستفادة من (A.18) ومن شرط التعامد (A.23) نجد أن

$$[\hat{P}] = (m\omega\hbar/2)^{1/2} \begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}$$

هنالك طريقة أبسط لحساب المصفوفتين $[\hat{x}]$ و $[\hat{P}]$. وبالحقيقة نجد من (6.2) أن

$$\hat{P} = \sqrt{\frac{m}{2}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \;, \quad \hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}(\hat{a}_- - \hat{a}_+)$$

وبالاستفادة من (8.7) و (8.10) نجد المصفوفتين المثلثتين لـ $\hat{x}$ و $\hat{P}$ وهما تكافئان طبعا (8.15) و (8.17) . (غير متساوية ولكنها متكافئة ، برهن على التكافؤ) .

مادام $\hat{H}$ و $\hat{P}$ و $\hat{x}$ ملحوظات فيزيائية فيجب ان تُمثّل بمصفوفات هرميتية ، ومن الواضح ان المصفوفات (8.9)و (8.17) و(8.15) هي كذلك . أما المصفوفتان (8.7) و (8.10) فهما غير هرميتيتين لأنهما لا تمثلان ملحوظين فيزيائيين .

§ 9. تمارين محلولة وغير محلولة :

١ . برهن أن x^2 و P^2 يمثلان بالمصفوفتين

$$[x^2] = \frac{\hbar}{2m\omega} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{6} & \cdots \\ \sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 7 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots \end{bmatrix} , \; [P^2] = \frac{m\omega\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & -\sqrt{6} & \cdots \\ -\sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \cdots \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & 7 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots \end{bmatrix} \qquad (9.1)$$

احسب بشكل عام x^2_{kn} .

احسب من المصفوفتين السابقتين مصفوفة $\hat{H}$.

٢ . سوف نحتاج في بحث الهزاز غير التوافقي في فصل نظرية الاضطراب الى حساب مصفوفة x^4 بيّن أن

$$(9.2) \qquad [x^4] = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\begin{bmatrix} 3 & 0 & 6\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 15 & 0 & 10\sqrt{6} & \cdots \\ 6\sqrt{6} & 0 & 27 & 0 & \cdots \\ 0 & 10\sqrt{6} & 0 & 55 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

٣ . برهن على صحة العلاقتين (6.3)

$$a_{\pm}^{\dagger} = \left(\frac{1}{\sqrt{2m}} P \pm i\sqrt{\frac{m}{2}}\,\omega x\right)^{\dagger}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2m}} P^{\dagger} \mp i\sqrt{\frac{m}{2}}\,\omega x^{\dagger}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2m}} P \mp i\sqrt{\frac{m}{2}}\,\omega x = a_{\mp}$$

٤ . برهن على صحة العلاقات (6.4) و (6.5) و (6.6) .

$$a_+ a_- = \left(\frac{1}{\sqrt{2m}} P + i\sqrt{\frac{m}{2}}\,\omega x\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2m}} P - i\sqrt{\frac{m}{2}}\,\omega x\right)$$
$$= \frac{1}{2m} P^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \frac{i}{2}\omega[\hat{x}, \hat{p}]$$
$$= H - \frac{1}{2}\hbar\omega$$

وبالمثل نبرهن على صحة العلاقة الأخرى . اما بالنسبة الى (6.5) فنجد

$$[a_+, a_-] = a_+ a_- - a_- a_+ = (H - \tfrac{1}{2}\hbar\omega) - (H + \tfrac{1}{2}\hbar\omega) = -\hbar\omega$$

أما بالنسبة الى (6.6) فنجد

$$[H, a_+] = [a_+ a_- + \tfrac{1}{2}\hbar\omega, a_+] = [a_+ a_-, a_+] + [\tfrac{1}{2}\hbar\omega, a_+]$$
$$= a_+[a_-, a_+] + [a_+, a_+]a_- + 0 = a_+(\hbar\omega) + 0 + 0$$
$$= \hbar\omega a_+$$

وبالمثل يتم البرهان على العلاقة الأخرى .

٥ . برهن ان المتوسط الزمني للطاقة الحركية **الكلاسيكية** للهزاز يساوى نصف طاقته الكلية .

الحل : يكفي ان نأخذ المتوسط الزمني خلال دور واحد P ، ويكون

$$\bar{T} = \frac{1}{P}\int_0^P T\,dt = \frac{\omega}{2\pi}\int_0^{2\pi/\omega} \frac{1}{2} m a^2\omega^2 \sin^2\omega t\,dt$$

$$= \frac{a^2\omega^3 m}{8\pi}\int_0^{2\pi} (1-\cos 2\omega t)\,dt$$

$$= \frac{1}{4} m a^2\omega^2 = \frac{1}{2} E .$$

٦ • احسب الشكل المستنظم لـ Ψ_0 .

نعلم ان تابع الحالة الدنيا هو من الشكل

$$\Psi_0 = A\, e^{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2} \qquad \beta = \sqrt{m\omega/\hbar}$$

وبحسب شرط الاستنظام نجد

$$1 = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta^2 x^2}\,dx = A^2\,\frac{\sqrt{\pi}}{\beta}$$

$$\Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}} = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} .$$

*****

[redacted] [redacted]

[redacted]

الفصل السابع

معادلات الحركة وقوانين الانحفاظ

١٥. التابع الموجي شبه الكلاسيكي :

لقد ذكرنا ان الميكانيك الكوانتي يحتوي الميكانيك الكلاسيكي كحالة حدية له. في ميكانيك الكم يوصف الجسيم بتابع موجي يعين احتمال القيم المختلفة لاحداثياته، ويحقق هذا التابع معادلة شرودنجر التي سلمنا بها في IV.§2 . ولقد وضعت هذه المسلمة آنئذ دون تبرير . سنرى الآن كيف نصل الى اسس معقولة تؤهبنا لقبول هذه المسلمة وذلك اعتمادا على المعلومات التي نحصل عليها بالمقارنة مع الميكانيك الكلاسيكي .

يعتبر الجسيم في الميكانيك الكلاسيكي نقطة مادية تتحرك في مسار معين يتحدد بمعادلات الحركة . ويبدو ان ثمة صلة بين ميكانيك الكم والميكانيك الكلاسيكي تشبه تلك الصلة القائمة في الالكترودينا ميك بين الضوء الموجي والضوء الهندسي. في الضوء الموجي توصف الامواج الكهرطيسية باشعة الحقلين الكهربائي والمغناطيسي والتي تحقق معادلات ماكسويل . اما الضوء الهندسي فيفترض ان الضوء ينتشر في مسارات محددة . بالمماثلة مع التشابه السابق يمكن ان نكتشف اسلوب الانتقال من الميكانيك الكوانتي الى نهايته الحدية وهي الميكانيك الكلاسيكي .

لندرس الآن كيف يتم الانتقال من ناحية رياضية من الضوء الموجي الى الضوء الهندسي. لتكن u اية مركبة من مركبات الحقل في موجة كهرطيسية ، ويمكن كتابة u بالشكل $u = a\,e^{i\phi}$ ، حيث ان a و ϕ حقيقيان . تدعى a السعة ويدعى

ϕ الطور . توافق الحالة الحدية (الضوء الهندسي) امواجا كهرطيسية قصيرة ويعبر عن هذا رياضيا بقولنا ان ϕ تتغير بمقدار كبير من أجل مسافات صغيرة ، ويعني هذا انه يمكن افتراض ϕ كبيرة بالقيمة المطلقة .

بشكل مشابه يمكن ان نفترض في النهاية الكلاسيكية لميكانيك الكم وجود تابع موجي كوانتي من الشكل $\psi = ae^{i\phi}$ حيث ان a تابع يتغير ببطء ، وتأخذ ϕ قيما كبيرة . في الميكانيك الكلاسيكي يتعين مسار الجسيم عن طريق مبدأ التغيير ، الذى تتم الحركة بموجبه على مسار يجعل الفعل S اصغريا . وفي الضوء الهندسي يتحدد المسار الضوئي بمبدأ فيرما الذى ينص على ان طول المسار الضوئي للشعاع يجب ان يكون اصغريا ، أى أن الفرق بين طوري الشعاع عند بداية ونهاية المسار يجب ان يكون في نهايته الصغرى (او العظمى) . بناء على هذا الشبه يمكن القول ان الطور ϕ للتابع الموجي يجب ان يتناسب في النهاية الكلاسيكية مع الفعل S للجملة الفيزيائية المعتبرة ، أى S = ثابت$\times\phi$. ندعو هذا الثابت ثابت بلانك ونرمز له ب $\hbar$ ، وبذلك يكون التابع الموجي شبه الكلاسيكي

$$\psi = a e^{iS/\hbar} \tag{1.1}$$

يوصف الانتقال من الميكانيك الكوانتي الى الميكانيك الكلاسيكي بانه الانتقال الى النهاية $\hbar \to 0$ ، وهو يقابل تماما الانتقال من الضوء الموجي الى الضوء الهندسي والموافق الى انتقال الى نهاية قدرها طول موجة معدوم $\lambda \to 0$.

لقد وضحنا كيف يكون الشكل الحدى للتابع الموجي ، ولكن تبقى كيفية ارتباط التابع الموجي بالحركة الكلاسيكية سؤالا مطروحا . بشكل عام لا تؤول الحركة الموصوفة بالتابع الموجي الى حركة في مسار معين . واما ارتباطها بالحركة الكلاسيكية ، فهي انه اذا اعطي التابع الموجي في لحظة ما ، ومن ثم التوزع الاحتمالي الموافق للاحداثيات ، فان هذا التوزع الاحتمالي يتغير تبعا لقوانين الميكانيك الكلاسيكي . ولكي نحصل على حركة في مسار معين ، يجب البدء بتابع موجي ذى شكل خاص ، اذ يجب أن يختلف هذا التابع الموجي عن الصفر فقط ضمن حيز صغير من الفراغ (ويسمى هذا

التابــــع حزمة موجية) ، ويجب ان تسعى ابعاد هذا الحيّز الى الصفر مــع $\hbar$. ويمكن القول انه في النهاية الكلاسيكية تتحرك الحزمة الموجية المرتبطة بجسيم علــى مساره الكلاسيكي .

٢ § . النهاية الحدية لموئثر هاميلتون :

يعين التابع الموجي تماما الحالة الفيزيائية للجملة في ميكانيك الكم . ويعنــي هذا انه اذا اعطي هذا التابع في لحظة ما ، فان خواص الجملة في تلك اللحظة وفي اللحظات اللاحقة تتعين الى الدرجة التي يسمح بها ميكانيك الكم . يعبر عن هــذا رياضيا بأن قيمة المشتق $\partial\psi/\partial t$ للتابع الموجي بالنسبة الى الزمن عند كل لحظــة يجب ان تتعين بقيمة التابع الموجي نفسه عند تلك اللحظة . وبحسب مبدأ تراكــب الحالات يجب ان تكون العلاقة بينهما خطية من الشكل

$$i\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{A}\,\psi\,. \tag{2.1}$$

ومن الواضح هنا ان ادخال i هو عملية اختيارية اذ يمكن امتصاصه في الموئثر الخطي A ، ولكن الشكل السابق للمعادلة انسب، وينتج منه ان $\hat{A}$ موئثر هرميتي. بالحقيقــة لدينا

$$0 = \frac{d}{dt}\int|\psi|^2 d\tau = \int\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right)d\tau$$

$$= \int\left[\psi^*(-iA\psi) + (-iA\psi)^*\psi\right]d\tau$$

$$\Rightarrow \int\psi^* A\psi\, d\tau = \int(A\psi)^*\psi\, d\tau \tag{2.2}$$

وبما ان هذه العلاقة محققة من أجل ψ كيفي لذلك يجب ان يكون $\hat{A}$ هرميتيا .

لنبحث الآن عن الكمية الكلاسيكية التي يقابلها $\hat{A}$. وللقيام بهذا نعوض بالعبارة الحدية للتابع الموجي (1.1) في (2.1) لنجد أن

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\,\frac{\partial S}{\partial t}\,\psi \tag{2.3}$$

وليس من الضروري اشتقاق a لانه تابع بطيء التحول . وبمقارنة هذه النتيجة مع (2.1) نجد ان $\hat{A}$ يختزل في النهاية الحدية الى $-\frac{1}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}$. ونعلم من الميكانيك الكلاسيكي ان $-\partial S/\partial t$ هو تابع هاميلتون H ، ولذلك نكتب (2.3) بالشكل

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \qquad (2.4)$$

حيث ان $\hat{H} = \hbar\hat{A}$ ويسمى موئثر هاميلتون . وبقي ختاما ان نحدد عبارة $\hat{H}$ لكي نجد معادلة شرودنجر الموجية التي سلمنا بها في (IV.§2) . اذا قبلنا بالمسلمة الثالثة اصبح شكل $\hat{H}$ معين تماما واصبحت (2.4) منطبقة مع معادلة شرودنجر الموجية . سوف نرى تبريرا اعمق لتمثيل $\hat{H}$ بالشكل الذى تقترحه المسلمة الثالثة .

§3. المشتق الزمني لملحوظ فيزيائي :

لا يمكننا تعريف مشتق ملحوظ فيزيائي في ميكانيك الكم بالطريقة نفسها التي نعرفها بها في الميكانيك الكلاسيكي . فتعريف مشتق كمية في الميكانيك الكلاسيكي يتطلب اعتبار قيمتي هذه الكمية عند لحظتين زمنيتين متجاورتين ومختلفتين . ولكن في ميكانيك الكم لا يكون للكمية التي لها قيمة محددة عند لحظة زمنية ما ، لا يكون لها قيمة محددة عند لحظة زمنية اخرى . ولذلك يجب ان يعرف المشتق الزمني لملحوظ فيزيائي في الميكانيك الكوانتي بطريقة تختلف عما هي عليه في الميكانيك الكلاسيكي. من الطبيعي ان نعرف المشتق الزمني $d\hat{F}/dt$ لملحوظ فيزيائي $\hat{F}$ بأنه كمية تساوى قيمتها الوسطى (المتوقعة) المشتق الزمني للقيمة الوسطى للملحوظ الفيزيائي $\hat{F}$. ويكون لدينا بحسب هذا التعريف

$$\left\langle \frac{d\hat{F}}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt}\langle \hat{F} \rangle \qquad (3.1)$$

ومن السهل بدءاً من هذا التعريف الحصول على عبارة المشتق الزمني لملحوظ فيزيائي $\hat{F}$. وبالفعل وبحسب التعريف (3.1) نجد أن

$$\left\langle \frac{d\hat{F}}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt}\langle \Psi | \hat{F}\Psi \rangle \qquad (3.2)$$

$$= \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} \middle| \hat{F}\Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial \hat{F}}{\partial t}\Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \hat{F}\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle$$

وبالتعويض بعبارة $\partial\Psi/\partial t$ من (2.4) نجد

$$(3.3)\quad \langle \frac{d\hat{F}}{dt} \rangle = \langle \frac{1}{i\hbar} H\Psi | F\Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{\partial F}{\partial t}\Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{1}{i\hbar} FH\Psi \rangle$$

$$= \langle \Psi | \{ \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[F, H] \} \Psi \rangle$$

وذلك بعد ملاحظة ان $\hat{H}$ هرميتي . ومن ناحية ثانية لدينا

$$(3.4)\quad \langle \frac{d\hat{F}}{dt} \rangle = \langle \Psi | \frac{d\hat{F}}{dt} \Psi \rangle$$

بمقارنة العبارتين (3.3) و (3.4) نجد أن

$$(3.5)\quad \frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{H}]$$

تعرف هذه المعادلة المشتق الزمني لملحوظ فيزيائي في صورة شرودنجر، ويتعين $\hat{H}$ فيها طبقا لقواعد المسلمة الثالثة . اذا كان $\hat{F}$ ملحوظا فيزيائيا لا يتعلق صراحة بالزمن كان

$$(3.6)\quad \frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{H}]$$

تفرز هذه المعادلة صفا مهما من الملحوظات الفيزيائية ، وهي تلك التي لا تتعلق بالزمن صراحة وتتآلف مع موءثر هاميلتون . اذا كان $\hat{F}$ ملحوظا من هذا الصف فان $d\hat{F}/dt = 0$ ، وبالتالي فان $\hat{F}$ محفوظ او ثابت للحركة .

اذا كان $\hat{F}$ ثابتا للحركة $(d\hat{F}/dt = 0)$ كان

$$(3.7)\quad \frac{d}{dt}\langle \hat{F} \rangle = \langle \frac{d\hat{F}}{dt} \rangle = 0 ,$$

وكان بالتالي $\langle \hat{F} \rangle$ ثابتا للحركة . بعبارة اخرى تكون القيمة المتوقعة لملحوظ محفوظ ثابتا للحركة . اذا كانت الجملة في حالة خاصة ψ_n للملحوظ $\hat{F}$ كانت قيمة $\hat{F}$ قاطعة وتساوى القيمة الخاصة f_n المقابلة ل ψ_n ، وهي القيمة المتوقعة $\langle F \rangle_{\psi_n}$ نفسها. ينتج اذن انه اذا كان ل $\hat{F}$ قيمة موءكدة في لحظة ما فانه يبقى على تلك القيمة في اللحظات اللاحقة .

في الحالة التي يكون فيها المؤثر $\hat{F}$ تابعا في الزمن ويتآلف مع مؤثر هاميلتون فان مشتقه التام بالنسبة للزمن ينطبق مع مشتقه الجزئي بالنسبة له

$$d\hat{F}/dt = \partial\hat{F}/\partial t \, .$$

نحن الآن في موقع نستطيع فيه عرض منهجي شرود نجر وهايزنبرغ في تمثيل الملحوظات الفيزيائية والتوابع الموجية وتطورها بدلالة الزمن ، او ما يسمى بصورتي شرود نجر وهايزنبرغ لميكانيك الكم . وقبل ان نخوض في عرض هاتين الصورتين لا بد لنا من التعرف على التحويلات الواحدية ودراسة خواصها الرياضية .

§ 4 التحويلات الواحدية :

§ (4.1) المؤثرات الواحدية :

نقول عن مؤثر $\hat{U}$ انه واحدي اذا كان

١ . ساحة تعريفه ≡ مداه ≡ كل فراغ التوابع الموجية $\mathcal{L}^2$.

٢ـ يحافظ U على الجداء الداخلي : $\langle U\psi | U\varphi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle$. (4.1)

استنادا الى التعريف السابق يمكن البرهان بسهولة على الحقائق التالية المتعلقة بمؤثر واحدي .

١ . يحافظ $\hat{U}$ على النظيم (او النظيم لا متغير تحت $\hat{U}$) : $\|U\psi\| = \|\psi\|$

٢ . $\hat{U}$ واحدى $\Longleftrightarrow$ $UU^+ = I = U^+U$

٣ . $\hat{U}$ واحدى $\Longleftrightarrow$ $U^+ = U^{-1}$ و ساحة تعريف $U \equiv \mathcal{L}^2$

٤ . اذا كانت λ قيمة خاصة لمؤثر واحدى فان $|\lambda| = 1$.

§ (4.2) التحويلات الواحدية :

ليكن $\hat{U}$ مؤثرا واحديا وليكن $\psi \in \mathcal{L}^2$ و $\hat{A}$ مؤثرا في $\mathcal{L}^2$. نعرف*

. التحويل الواحدى لتابع موجي كيفي ψ بالشكل $\psi' = U^+\psi$

. التحويل الواحدى لمؤثر كيفي $\hat{A}$ في $\mathcal{L}^2$ بالشكل $\hat{A}' = U^+\hat{A}U$. (4.2)

وبالاستناد الى هذا التعريف يمكن البرهان على الحقائق التالية :

---

* يمكن وضع التعريف (4.2) بشكل آخر $A' = UAU^+$ و $\psi' = U\psi$.

١ . تحافظ التحويلات الواحدية على الجداء الداخلي

$$\langle \Psi' | \Phi' \rangle = \langle U\Psi | U\Phi \rangle = \langle \Psi | \Phi \rangle$$

٢ . تحافظ التحويلات الواحدية على المعادلات المؤثرية ، فمثلا

$$\hat{A}_1 + \hat{A}_2 = \hat{A}_3 \iff \hat{A}'_1 + \hat{A}'_2 = \hat{A}'_3$$

$$\hat{A}_1 \hat{A}_2 = \hat{A}_3 \iff A'_1 A'_2 = A'_3$$

وبشكل عام ، واذا كان f تابعا نظاميا في المؤثرات $\hat{A}_i$ ، فان

$$f(\hat{A}_i) = 0 \iff f(\hat{A}'_i) = 0$$

ينتج بشكل خاص ان التحويلات الواحدية تحافظ على المبادل

$$[A'_1, A'_2] = A'_1 A'_2 - A'_2 A'_1 = U^{+} A_1 U U^{+} A_2 U - U^{+} A_2 U U^{+} A_1 U$$

$$= U^{+}(A_1 A_2 - A_2 A_1) U = U^{+}[A_1, A_2] U = [A_1, A_2]'$$

فاذا كان $[A_1, A_2] = B$ كان $[A'_1, A'_2] = B'$.

٣ . القيم الخاصة لمؤثر لا متغيرة تحت U ، فاذا كان $A\Psi = \lambda\Psi$ فان

$$A'\Psi' = U^{+} A U U^{+} \Psi = U^{+} A \Psi = \lambda \Psi'$$

٤ . تحافظ التحويلات الواحدية على القيم المتوقعة لمؤثر

$$\langle A' \rangle_{\Psi'} = \langle \Psi' | A' \Psi' \rangle = \langle U^{+}\Psi | U^{+} A U U^{+} \Psi \rangle$$

$$= \langle U U^{+} \Psi | A U U^{+} \Psi \rangle = \langle \Psi | A \Psi \rangle = \langle A \rangle_{\Psi}$$

§ (4.3) التحويلات اللامتناهية في الصغر

نطلق اسم موثر لا متناه في الصغر على موثر لا متناه في القرب من الموثر المطابق I . وبشكل رمزي

$$\hat{U} = I - i\epsilon \hat{G}$$

حيث ان ϵ عدد حقيقي لا متناه في الصغر و $\hat{G}$ موثر ما . من الواضح ان اثر هذا الموثر على تابع ما هو تغيير طفيف في قيمته

$$\hat{U}\Psi(\underline{r}) - \Psi(\underline{r}) = i\epsilon \hat{G} \Psi(\underline{r}) .$$

اذا كان $\hat{G}$ هرميتيا يكون $\hat{U}$ واحديا للمرتبة الأولى في ϵ ، والعكس صحيح ايضاً. تبرهن هذه الافادة بسهولة

$$U U^{\dagger} = (I - i\epsilon\hat{G})(I + i\epsilon G^{\dagger}) = I + i\epsilon(G^{\dagger} - G) + O(\epsilon^2)$$

حيث ان $O(\epsilon^2)$ هو لا متناه في الصغر من مرتبة ϵ^2 ، الآن واذا كان $G = G^{\dagger}$ فـــان $U U^{\dagger} = I$ ، وبشكل مشابه نبرهن على أن $U^{\dagger} U = I$.

نطلق اسم تحويلات واحدية لا متناهية في الصغر على تلك التي تنتج من مؤثـــر واحدي لا متناه في الصغر .

§ (٤.٩) تمارين على التحويلات الواحدية :

١ • برهن على صحة الحقائق الواردة في § (٤.١)

٢ • برهن في § (4.2) على الحقيقة (3) بدءاً من الحقيقة (2) ثم برهن عليها بدءاً من الحقيقة (4) .

٣ • برهن انه اذا كان $\hat{U}$ موئثر واحدي في فراغ هلبرت منتهي البعد وكانـــــت $[U_{ij}]$ المصفوفة المثلة له فان $\det[U_{ij}] = e^{i\theta}$ حيث ان θ عدد حقيقي .

٤ • ليكن $\hat{A}$ موئثرا في فراغ هلبرت منتهي البعد ،بعده n ، ولتكن $[A_{ij}]$ المصفوفـــة المثلة له . برهن على أن : (i) $\det[A_{ij}]$ لا متغير تحت التحويلات الواحدية (ii) أثـــر هذه المصفوفة $[Trace[A_{ij}] = \sum_i A_{ii}]$ لا متغير تحت التحويـــلات الواحدية .

٥ • برهن ان عوامل المعادلة المميزة (امثال قوى λ)

$$\det[A - \lambda I] = 0$$

المتعلقة بالموئثر $\hat{A}$ لا متغيرة تحت التحويلات الواحدية .

برهان : ليكن $A' = U^{\dagger} A U$ ، فيكون لدينا

$$\begin{aligned}
\det[A' - \lambda I] &= \det[U^{-1} A U - \lambda I] \\
&= \det[U^{-1}(A - \lambda I) U] \\
&= \det[U^{-1}] \det(A - \lambda I) \det[U] \\
&= \det[U^{-1} U] \quad \det(A - \lambda I) \\
&= \det[A - \lambda I]
\end{aligned}$$

الآن ، ومادامت $det[A-\lambda I]$ و $det[A'-\lambda I]$ متساويين ككثيرى حدود في λ، مهما تكن λ . لذلك يجب ان تكون امثال λ^m $(m=0,1,\dots,n)$ متساوية .

بشكل خاص يكون عاملا λ^0 (الحد المستقل عن λ) متساويين ، ولكن عامل λ^0 ليس سوى المعين الموافق ، ومنه نجد أن $det[A] = det[A']$.

بشكل خاص ايضا نرى ان عاملي $(-\lambda)^{n-1}$ متساويان في مفكوكي المعينين. ولكن كل من هذين العاملين هو اثر المصفوفة الموافقة . وينتج اذن ان

$$Trace[A] = Trace[A']$$

تمرين 6 : برهن انه اذا كان $\hat{G}$ موئثرا هرميتيا فان الموئثر

$$U = e^{i\epsilon G} = I + \frac{i\epsilon G}{1!} + \frac{(i\epsilon G)^2}{2!} + \cdots$$

حيث ان ϵ حقيقي يكون واحديا .

برهان :

$$U^+ = e^{-i\epsilon G^+} = e^{-i\epsilon G} = U^{-1}$$

§ 5 صورتا شرودنجر وهايزنبرغ :

لتكن لدينا جملة ليست في حقل خارجي متغير . بغياب الحقل الخارجي الموئثر على الجملة او بثباته بمرور الزمن ، تكون كل اللحظات الزمنية متكافئة بالنسبة للجملة ولهذا لا يمكن ان يحتوي موئثر هاميلتون على الزمن صراحة . وبما ان كل موئثر يتآلف مع نفسه لذلك نستنتج ان هاميلتوني جملة ليست في حقل متغير يكون محفوظا . وكما نعلم ، فان الهاميلتوني المحفوظ ليست سوى طاقة الجملة ، ولهذا فانا نتوصل الى قانون حفظ الطاقة في ميكانيك الكم.ويعني هذا القانون هنا أنه اذا كانت لطاقة الجملة قيمة قاطعة في لحظة ما فانها تبقى كذلك بمرور الزمن . بحسب المسلمة الثانية تتعين توابع الحالات المستقرة التي تكون فيها قيم الطاقة قاطعة بالمعادلة الخاصة

وبحسب المعادلة (2.4) يكون $H\Psi_n = E_n \Psi_n$

$$i\hbar\, \partial \Psi_n/\partial t = H\Psi_n = E_n \Psi_n \qquad (5.1)$$

وبمكاملة هذه المعادلة نجد

$$\Psi_n = e^{-iE_n t/\hbar}\, u_n(\underline{r}) \qquad (5.2)$$

وكنا قد حصلنا على هذه النتيجة لدى الحديث عن فصل معادلة شرودنجر . والتوابع u_n هنا هي طبعا حلول المعادلة الخاصة $H u_n = E_n u_n$. بحسب مبدأ تراكب الحالات يكتب تابع حالة عام بالشكل

$$\Psi(\underline{r},t) = \sum_n c_n\, e^{-iE_n t/\hbar}\, u_n \qquad (5.3)$$

وهذه الصيغة تعين تابعية Ψ للزمن .

في صورة شرودنجر تُمثَّل الملحوظات الفيزيائية المستقلة عن الزمن كالطاقة والدفع والعزم الحركي مثلا بموءثرات لا تتعلق صراحة بالزمن . اما طريقة تمثيل هذه الملحوظات بموءثرات فتتم طبقا لقواعد المسلمة الثالثة .وأما امكانية تعلق القيم المتوقعة لهذه الملحوظات بالزمن فتأتي من أن التابع الموجي في تمثيل شرودنجر يتعلق بالزمن (المعادلة (5.3)) وهكذا يظهر الزمن في المعادلة التي تعرف القيمة المتوقعة لملحوظ فيزيائي F لا يتعلق صراحة الزمن

$$\langle F\rangle(t) = \int \Psi^*(\underline{r},t)\, F(\underline{r})\, \Psi(\underline{r},t)\, d\tau \qquad (5.4)$$

يمكن صياغة مسألة التمثيل وفق صورة مختلفة ولكنها مكافئة للصورة السابقة،وفي هذه الصورة تنتقل تابعية الزمن من التوابع الموجية الى الملحوظات الفيزيائية وتسمى وجهة النظر الجديدة صورة هايزنبرغ .

لنعرف موءثرا

$$\hat{S} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H} t} \qquad (5.5)$$

حيث ان $\hat{H}$ هاميلتوني الجملة . وبحسب تعريف هذا الموءثر كتابع في $\hat{H}$ تكون

توابعه الخاصة هي التوابع الخاصة u_n ل $\hat{H}$ نفسها ، وقيمه الخاصة توابع في E بالشكل نفسه الذى يتبع $\hat{S}$ فيه $\hat{H}$ (ارجع الى بحث المعادلة الخاصة) .

$$\hat{S}\, u_n(\underline{r}) = e^{-iE_n t/\hbar}\, u_n(\underline{r}) \qquad (5.6)$$

وينتج من هذا ان المنشور (5.3) لتابع حالة عام بدلالة توابع الحالات المستقرة يمكن ان يكتب بالشكل

$$\begin{aligned}\Psi(\underline{r},t) &= \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar}\, u_n(\underline{r}) \\ &= \sum_n c_n \hat{S}\, u_n(\underline{r}) \\ &= \hat{S}\,\Psi(\underline{r},0) \qquad (5.7)\end{aligned}$$

ويدل هذا على أن أثر $\hat{S}$ على تابع حالة للجملة في لحظة ابتدائية ، هو تحويلـه الى تابع حالة للجملة في لحظة كيفية اخرى .

بحسب التعريف (5.5) وبالاستفادة من أن $\hat{H}$ هرميتي ، نجد أن

$$S^{+} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = S^{-1} \qquad (5.8)$$

وينتج من هذا ان $\hat{S}$ مؤثر واحدي .

اذا كان $\hat{F}$ المؤثر الممثل لملحوظ فيزيائي في صورة شرودنجر ، فانا نعـرف المؤثر التابع للزمن

$$\hat{F}(t) = S^{-1}\hat{F}\,S \qquad (5.9)$$

ويؤخذ كممثل للملحوظ الفيزيائي المعتبر في صورة هايزنبرغ.ويكون هنا تعلق القيـم المتوقعة لملحوظ فيزيائي بالزمن نتيجة لتعلق الملحوظ به ، كما تظهر العلاقـة التالية

$$\langle \hat{F}(t)\rangle = \int \Psi^{*}(\underline{r},0)\,\hat{F}(t)\,\Psi(\underline{r},0)\,d\tau \qquad (5.10)$$

باشتقاق المعادلة (5.9) تحت فرض ان $\hat{F}$ و $\hat{H}$ لا يتعلقان صراحـة بالزمن نجد

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{F}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{H}]$$

وهي تشبه في الشكل (3.6) ولكنها تختلف عنها في المعنى ، فالعبارة (3.6) تعرف موءثرا $(d\hat{F}/dt)$ يمثل الكمية الفيزيائية (dF/dt) ، بينما يمثل الطرف الايمن من (5.11) المشتق الزمني للموءثر الممثل للكمية $\hat{F}$ بحد ذاتها .

للبرهان على تكافوء الصورتين السابقتين ، نلتزم موءقتا برموز تصاحبها ادلة للاشارة الى موءثر هاميلتون والملحوظات الفيزيائية والتوابع الموجية في صورتي شرود نجر وهايزنبرغ .

في صورة شرود نجر $\hat{H}_s$ و $\hat{F}_s$ و $\Psi_s(t)$

في صورة هايزنبرغ $\hat{H}_h$ و $F_h(t)$ و Ψ_h

حيث نعرف هذه الملحوظات الفيزيائية والتوابع الموجية في احدى الصورتين على انها تحويل واحدى للملحوظات والتوابع الموحية في الصورة الاخرى

$$\Psi_h = S^{-1}\Psi_s(t) \Leftrightarrow \Psi_s(t) = S\Psi_h \qquad (5.12)$$

$$F_h(t) = S^{-1}F_s S \Leftrightarrow F_s = S F_h(t) S^{-1} \qquad (5.13)$$

حيث ان S هو الموءثر الواحدى

$$S = e^{H_s t/(i\hbar)} . \qquad (5.14)$$

نلاحظ اولا ان موءثر هاميلتون له التمثيل نفسه في الصورتين

$$\hat{H}_h = S^{-1}H_s S = S^{-1}S\hat{H}_s = \hat{H}_s = \hat{H}$$

وذلك لأن S و $\hat{H}_s$ متآلفان . بناء على هذا واذا كان $\hat{H}$ لا يتبع الزمن صراحة فانه يمثل في الصورتين بموءثر مستقل عن الزمن .

أما اثر الموءثر S^{-1} على تابع حالة $\Psi_s(\underline{r},t)$ في لحظة كيفية t ، فهو ارجاعه الى قيمته

$$\Psi_h = S^{-1}\Psi_s(\underline{r},t) = \Psi_s(\underline{r},0) \qquad (5.16)$$

في لحظة البدء . وهكذا نرى ان التوابع الموجية Ψ_h مستقلة عن الزمن .

ختاما يجب ان يتعين المشتق الزمني لملحوظ فيزيائي $\hat{F}_h(t)$ بمعادلة هايزنبرغ في حركته. وبالفعل لدينا

$$\frac{d\hat{F}_h}{dt} = \frac{\partial S^{-1}}{\partial t}\hat{F}_s S + S^{-1}\frac{\partial \hat{F}_s}{\partial t} S + S^{-1}\hat{F}_s \frac{\partial S}{\partial t} \tag{5.17}$$

وبالاستفادة من عبارة S (5.14) نجد

$$\frac{dF_h}{dt} = -\frac{1}{i\hbar} H S^{-1} F_s S + \frac{1}{i\hbar} S^{-1} F_s S H + S^{-1}\frac{\partial F_s}{\partial t} S$$

$$= \frac{1}{i\hbar}(F_h H - H F_h) + \frac{\partial F_h}{\partial t}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}[F_h, H] + \frac{\partial F_h}{\partial t} \qquad \left(\frac{\partial F_h}{\partial t} \equiv S^{-1}\frac{\partial F_s}{\partial t} S\right) \tag{6.18}$$

ولقد اخذنا في الحسبان في العلاقة (5.17) احتمال ان يتعلق F_s بالزمن صراحة . في الحالة التي لا يظهر فيها الزمن صراحة في F_s ينعدم الحد الثاني في (5.17) و (5.18) .

§ 6 نظرية ارينفست :

تنص نظرية ارينفست على ان القيم المتوقعه للمتحولات القانونية $\hat{q}_i$ و $\hat{p}_i$ لجملة كوانتية ، تخضع " شكليا " لقوانين الميكانيك الكلاسيكي . بالفعل وباستعمال صورة هايزنبرغ نجد

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \frac{d}{dt}\langle\psi|F|\psi\rangle = \langle\psi|\frac{dF}{dt}|\psi\rangle = \langle\frac{dF}{dt}\rangle \tag{6.1}$$

وهي نتيجة كنا قد وضعناها كتعريف لمشتق ملحوظ فيزيائي . ومن معادلة هايزنبرغ في الحركة نجد ، بعد التعويض من أجل $d\hat{F}/dt$ ، ان

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[F, H]\rangle + \langle\frac{\partial F}{\partial t}\rangle \tag{6.2}$$

وباستبدال المتحولات القانونية ب $\hat{F}$ نجد

$$i\hbar \frac{d}{dt}\langle \hat{q}_i \rangle = \langle [\hat{q}_i, \hat{H}] \rangle \ , \quad i\hbar \frac{d}{dt}\langle \hat{p}_i \rangle = \langle [\hat{p}_i, \hat{H}] \rangle \tag{6.3}$$

وباجراء حساب بسيط في الطرف الثاني لكل من المعادلتين السابقتين نجد

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{q}_i \rangle = \langle \partial \hat{H}/\partial \hat{p}_i \rangle \ , \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{p}_i \rangle = \langle \partial \hat{H}/\partial \hat{q}_i \rangle \tag{6.4}$$

ربما لاحظ القارىء كلمة " شكليا " المذكورة سابقا ، وبالفعل فليس صحيحا وبشكل عام ان القيم المتوقعة $\langle \hat{q}_i \rangle$ و $\langle \hat{p}_i \rangle$ تخضع لقوانين الحركة في الميكانيك الكلاسيكي . ففي الميكانيك الكلاسيكي تعطى مشتقات $\hat{q}_i$ و $\hat{p}_i$ الزمنية بتوابع معينة في المتحولات القانونية وهي $\partial H/\partial p_i$ و $-\partial H/\partial q_i$ ، ويمكن حساب قيم هذه المتحولات في أية لحظة بعد معرفة قيمها الابتدائية . لكن العلاقات (6.4) تنص على ان المشتقات الزمنية ل $\langle \hat{q}_i \rangle$ و $\langle \hat{p}_i \rangle$ تساوي على الترتيب ، القيم المتوقعة للملحوظات $\partial \hat{H}/\partial \hat{p}_i$ و $-\partial \hat{H}/\partial \hat{q}_i$ وحساب هذه القيم المتوقعة يتطلب معرفة تابع الحالة $\Psi(t)$.

بالحقيقة ان القيم المتوقعة $\langle q_i \rangle$ و $\langle p_i \rangle$ لا تطيع قوانين الحركة الكلاسيكية الا اذا امكن ان نستبدل بالقيم المتوقعة لمشتقات $\hat{H}$ الجزئية مشتقات $\hat{H}$ كتوابع في القيم المتوقعة ، وبالتحديد اذا كان

$$\langle \frac{\partial}{\partial \hat{p}_i} H(\hat{q}_i, \hat{p}_i) \rangle = \frac{\partial H}{\partial p_i}(\langle \hat{q}_i \rangle, \langle \hat{p}_i \rangle) \tag{6.5}$$

$$\langle \frac{\partial}{\partial \hat{q}_i} H(\hat{q}_i, \hat{p}_i) \rangle = \frac{\partial H}{\partial q_i}(\langle \hat{q}_i \rangle, \langle \hat{p}_i \rangle) \tag{6.6}$$

يمكن اجراء هذا الاستبدال حصرا في الحالة التي يكون فيها الهاميلتوني كثير حدود من الدرجة الثانية في $\hat{q}_i$ و $\hat{p}_i$ مثل الهزاز التوافقي ، والجسيم الحر والجسيم المشحون في حقل كهربائي او مغناطيسي ثابت) .

7.5 التناظر وقوانين الانحفاظ :

من الحقائق المدهشة في الطبيعة أنه من بين الخواص الفيزيائية المتعددة للجمل

الفيزيائية التي تتغير مع الزمن ، ثمة عدد قليل يبقى ثابتا بمرور الزمن . تسمى هـذه الخواص الفيزيائية الثابتة قوانين الانحفاظ ، ويقال عن الكميات التي تعبر هذه القوانين عن حفظها انها ثوابت للحركة .

يرتكز ميكانيك الكم ـ ومن قبله الميكانيك الكلاسيكي ايضا ـ على الغرض الضمني بأن فراغنا المألوف يخضع لقوانين الهندسة الاقليدية ، وبان هذا الفراغ من الناحية الفيزيائية متجانس ومتماثل المناحي . ونعني بهذا انه يمكن ان ننقل جملتنا الفيزيائية ككل وادوات القياس من مكان الى آخر وان نغير مناحيها دون ان تتغير نتيجة اية تجربة . نعبر عن هذا بقولنا انه ليس ثمة موضع او منحى مفضّل في الفراغ او ان كل المواضع وكل المناحي متكافئة .

من الحقائق الهامة حول الجمل الفيزيائية صفاتها التناظرية ، أى التحويلات التي تترك العلاقات الفيزيائية بين عناصر الجملة دون تغيير . فمثلا ان سحب جملة مؤلفة من عدة جسيمات ليست في حقل خارجي او تدويرها ككل حول اية نقطة من الفراغ لا يغير اى وجه من وجوهها الفيزيائية .

لقد كان جاكوبي اول من لاحظ العلاقة الوثيقة بين الخواص الديناميكية التناظرية لجملة وقوانين الانحفاظ . وقد جاءت ملاحظة جاكوبي في الميكانيك الكلاسيكي عام 1884 اذ بيّن ان "لا تغير" تابع لاغرانج لجملة تحت زمرة الانسحابات يقتضي أن دفع الجملة محفوظ ، وأن لا تغيره تحت زمرة الدورانات يؤدى الى انحفاظ العزم الحركي . في عام 1887 اشتق شوتز مبدأ انحفاظ الطاقة من "لا تغير" تابع لاغرانج تحت زمرة انسحابات الزمن . وفي عام 1911 اعطى هيرغلوتز مناقشة كاملة لثوابت الحركة النسبية العشرة والمتعلقة بلاتغير تابع لاغرانج تحت زمرة لورانتز غير المتجانسة

بالحقيقة وسواء في ميكانيك الكم او في الميكانيك الكلاسيكي ، يقتضي لا تغير الهاميلتوني تحت تحويلات الانسحابات والدورانات وانسحابات الزمن الى انحفاظ الدفع والعزم الحركي والطاقة . في ميكانيك الكم ومتى تحقق قانون انحفاظ لجملة

يكون مؤثر هاميلتون المتعلق بالجملة لا متغيرا تحت زمرة تحويلات التناظر المقابلة لقانون الانحفاظ .

§ 8 . التناظر والدفع:

لنعتبر جملة من الجسيمات ليست عرضة لحقل خارجي . وبما أن جميع المواضع في الفراغ متكافئة بالنسبة للجملة ، لذلك يمكن القول ان هاميلتوني الجملة لا يتغير عندما نطبق انسحابا كيفيا على الجملة . وبشكل خاص يكون هذا الشرط محقق ايضا من اجل انسحاب لا متناه في الصغر .

يكافئ سحب الجملة بالشعاع $\delta \underline{r}$ بالنسبة للثلاثية المتعامدة $oxyz$ ، تحويلا احداثياً تنسحب فيه هذه الثلاثية المتعامدة والجملة في مكانها بشعاع $\delta \underline{r}$ -

$$\underline{r} \longrightarrow \underline{r} + \delta \underline{r} \tag{8.1}$$

يؤدي الانسحاب اللامتناهي في الصغر $\delta \underline{r}$ الى تزايد انصاف الاقطار الشعاعية $\underline{r}_\alpha$ (حيث ان α رقم الجسيم) للجسيمات بالكمية $\delta \underline{r}$ نفسها . اى أن

$$\underline{r}_\alpha \longrightarrow \underline{r}_\alpha + \delta \underline{r}$$

وينتقل تابع كيفي $\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \ldots)$ في احداثيات الجسيمات تحت التحويل الاحداثي (8.1) الى التابع

$$\Psi(\underline{r}_1 + \delta \underline{r}, \underline{r}_2 + \delta \underline{r}, \ldots) = \Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \ldots) + \delta \underline{r} \sum_\alpha \nabla_\alpha \Psi \tag{8.2}$$

$$= (I + \delta \underline{r} \cdot \sum_\alpha \nabla_\alpha) \Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \ldots)$$

حيث ان

$$\nabla_\alpha = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} i + \frac{\partial}{\partial y_\alpha} j + \frac{\partial}{\partial z_\alpha} k \tag{8.3}$$

وأما المؤثر

$$I + \delta \underline{r} \sum_\alpha \nabla_\alpha \tag{8.4}$$

فهو موئثر لا متناه في الصفر يحول التابع $\psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \ldots)$ الى التابع

$$\psi(\underline{r}_1 + \delta\underline{r}, \underline{r}_2 + \delta\underline{r}, \ldots) \tag{8.5}$$

عند ما نقول ان تحويلا ما لا يغير الهاميلتوني ، فانما نعني بذلك أنه اذا اجرينا التحويل على التابع $H\psi$ فالنتيجة تكافىء اجراء التحويل على ψ ثم تطبيق H . ليكن $\hat{A}$ الموئثر الذى يعبر عن التحويل ، نعبر الان عن شرط لا تغير الهاميلتوني بالعبارة

$$\hat{A}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(\hat{A}\psi), \forall\psi \Rightarrow [\hat{A}, \hat{H}] = 0 \tag{8.6}$$

أى أن الهاميلتوني يكون لا متغيرا تحت تحويل ما اذا كان متآلفا مع موئثر التحويل. وفي حالتنا نرى أن $\hat{A}$ هو الموئثر اللامتناهي في الصفر (8.4) . وبما ان موئثر الواحدة يتآلف مع $\hat{H}$ و δr موئثر ضرب ثابت لذلك نجد

$$\left(\sum_\alpha \nabla_\alpha\right)\hat{H} - \hat{H}\left(\sum_\alpha \nabla_\alpha\right) = 0 \tag{8.7}$$

ولكن تآلف موئثر لا يحتوي الزمن صراحة مع $\hat{H}$ يعني ان الكمية الفيزيائية التي يمثلها هذا الموئثر محفوظة . وتسمى الكمية التي ينتج انحفاظها من تجانس الفراغ الدفع. ولذلك تعبر العلاقة (8.7) عن قانون حفظ الدفع في ميكانيك الكم ، ويجب ان يُقابل الموئثر $\sum\nabla_\alpha$ بعد غض النظر عن ثابت ضرب الدفع الكلي للجملة ، ويقابل كل حد ∇_α بعد غض النظر عن ثابت الضرب نفسه دفع الجسيم α .

يُعيّن ثابت التناسب بين الموئثر $\hat{\underline{p}}$ لدفع الجسيم والموئثر ∇ عن طريق الانتقال الى النهاية الحدية الكلاسيكية . من الواضح ان ثابت التناسب يجب ان يحتوى i لأن ∇ ضد هرميتي ، وبوضع $\hat{\underline{p}} = c\nabla$ واستعمال عبارة التابع الموجي شبه الكلاسيكية (1.1) نجد

$$\hat{\underline{p}}\psi = \frac{i}{\hbar} c a e^{iS/\hbar} \nabla S = c(i/\hbar)\psi\nabla S.$$

بعبارة ثانية ان اثر الموئثر $\hat{p}$ على ψ في النهاية الكلاسيكية هو ضرب التابع الموجي ψ بالكمية $(i/\hbar)c\nabla S$. ونعلم من الميكانيك الكلاسيكي (I . 6.2) ، ان ∇S هو الدفع $\underline{p}$ للجسيم . وبحسب المسلمة الثالثة ، يجب ان يكون $\hat{\underline{p}}\psi = \underline{p}\psi$ حيث ان $\underline{p}$ القيمة الخاصة للدفع . ولهذا يجب ان يكون

$$\frac{ic}{\hbar} p = p \Rightarrow c = -i\hbar \qquad (8.9)$$

وهكذا يكون موئثر دفعجسيم ما،هـو

$$\hat{P} = -i\hbar \nabla \qquad (8.10)$$

تمرين : عبّرعن موئثر الانسحاب T_a، الذى يولده الانسحاب $\underline{r} \to \underline{r} + \underline{a}$ للجملة الاحداثية ،بدلالة الدفع .

الحـل : من تعريف T_a يجب ان يكون لدينا

$$T_a \Psi(\underline{r}) = \Psi(\underline{r} + \underline{a})$$

$$= \Psi(\underline{r}) + \underline{a}\, \partial\Psi(\underline{r})/\partial\underline{r} + \ldots \qquad \text{(بحسب تايلور)}$$

وبادخال الموئثر $\hat{P} = -i\hbar\nabla$ نجد

$$\Psi(\underline{r} + \underline{a}) = [1 + \frac{i}{\hbar} \underline{a}\cdot\underline{P} + (\frac{i}{\hbar} \underline{a}\cdot\underline{P})^2 + \cdots]\Psi(\underline{r}) \qquad (8.12)$$

والموئثر الموجود بين القوسين هو الموئثر

$$T_a = e^{\frac{i}{\hbar} \underline{a}\cdot\underline{P}} . \qquad (8.13)$$

لايجاد الموئثـــــر الممثل للعزم الحركي نستفيد من خاصة تماثل مناحـــي الفراغ . بسبب هذه الخاصة لا يمكن هاميلتوني جملة مغلقة ان يتغير اذا اديـــرت الجملة ككل حول محور كيفي بزاوية كيفية ،وبشكل خاص يبقى الهاميلتوني لا متغيــرا من اجل دوران لا متناه في الصفر . ليكن $\delta\underline{\varphi}$ شعاع دوران لا متناه في الصفـــر، وليكن T التحويل الاحداثي

$$\underline{r} \to \underline{r} + \delta\underline{r} = \underline{r} + \delta\underline{\varphi} \times \underline{r} \qquad (8.14)$$

ينقل هذا التحويل تابع كيفي $\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \ldots)$ في الاحداثيات الى التابع

$$\Psi(\underline{r}_1 + \delta\underline{r}_1, \underline{r}_2 + \delta\underline{r}_2, \ldots) = \Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \ldots) + \sum_\alpha \delta\underline{r}_\alpha \cdot \nabla_\alpha \Psi \qquad (8.15)$$

$$= \Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \cdots) + \sum_\alpha \delta\underline{\varphi} \times \underline{r}_\alpha \cdot \nabla_\alpha \Psi$$

$$= [I + \delta\underline{\varphi} \sum_\alpha \underline{r}_\alpha \times \nabla_\alpha]\, \Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \cdots)$$

وبما ان $\hat{H}$ لا متغير تحت T اذن يتآلف $\hat{H}$ مع المؤثر

$$I + \delta\underline{\varphi} \sum_{\alpha} \underline{r}_{\alpha} \times \nabla_{\alpha} \tag{8.16}$$

ومنه نجد

$$[\sum_{\alpha} r_{\alpha} \times \nabla_{\alpha} , \hat{H}] = 0 \tag{8.17}$$

وهذه العلاقة تعبر عن قانون انحفاظ معين . اما الكمية التي ينتج انحفاظها من تماثل مناحي الفراغ فهي العزم الحركي . وبذلك يمثل العزم الحركي الكلي للجملة $\underline{L} = \sum_{\alpha} \underline{r}_{\alpha} \times \underline{P}_{\alpha}$ بالمؤثر

$$\hat{\underline{L}} = c \sum_{\alpha} r_{\alpha} \times \nabla \tag{8.18}$$

ويجب ان يكون c عقديا صرفا لكي يكون المؤثر الاخير هرميتيا . بأخذ $c = -i\hbar$ يصبح المؤثر الاخير

$$\underline{L} = \sum_{\alpha} \underline{r}_{\alpha} \times \underline{P}_{\alpha}$$

منطبقا تماما في الشكل مع العزم الحركي الكلاسيكي .

تمرين : عبّر عن مؤثر الدوران $\hat{T}_{\varphi}$ الذى يولده دوران منته $\underline{\varphi}$ معين بزاوية φ بدلالة العزم الحركي (استفد من التمرين 6 في §9) .

§9 . التناظر ومؤثر هاميلتون

نبدأ باعتبار جسيم حر لا يخضع لأية قوة خارجية . وبما ان الفراغ متجانس تماما بالنسبة لهذا الجسيم لذلك يجب ألا يحتوي مؤثر هاميلتون المتعلق به على الاحداثيات صراحة ، ولذلك يجب التعبير عنه بدلالة دفع الجسيم فقط . وبما ان $\hat{H}$ تابع في الدفع اذن يتآلف $\hat{H}$ و $\hat{\underline{P}}$ ويكون لهما بالتالي مجموعة كاملة من التوابع الخاصة كما يكون لهما في الوقت نفسه قيم قاطعة . اى ان هذين الملحوظين موجودان معا . تتعين حالة الجسيم تماما بقيم دفعه ويكون قيم الطاقة E تابعا في الدفع . وبسبب تماثل مناحي الفراغ بالنسبة للجسيم الحر يجب ان تكون E تابعا في القيمة المطلقة لدفع الجسيم ولا تتعلق باتجاهه . اما الشكل الفعلي للتابع $E(\underline{P})$ فيتعين من مبدأ غاليليه في النسبية ، الذى يجب ان ينطبق في الميكانيك الكوانتي اللانسبي كما ينطبق

في الميكانيك الكلاسيكي . وكما رأينافي الميكانيك الكلاسيكي فان مبدأ غاليليه يقـود الى الشكل التربيعي $E = P^2/2m$ لعلاقة الطاقة بالدفع .

ينتج اذن ان العلاقة $E = P^2/2m$ يجب ان تتحقق من اجل كل حالة خاصة مشتركة للطاقة والدفع ، اى أن

$$\hat{H}\psi = E\psi = \frac{P^2}{2m}\psi = \frac{\hat{P}^2}{2m}\psi \qquad (9.1)$$

وذلك مهما تكن الحالة الخاصة المشتركة ψ . وبما ان مجموعة الحالات الخاصة هـذه كاملة لذلك نرى ان المؤثرين $\hat{H}$ و $\hat{P}^2/2m$ متطابقان . وينتج من هذا أن :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) \Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \qquad (9.2)$$

ومن اجل جملة مؤلفة من جسيمات لا تتفاعل فيما بينها ولا تخضع لقوى خارجية ، يكـون مؤثر ها ميلتون

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_\alpha \frac{1}{m_\alpha}\nabla_\alpha^2 \qquad (9.3)$$

اما شكل مؤثرها ميلتون لجملة جسيمات تتفاعل فيما بينها فلا يمكن استنتاجه من الاعتبارات التناظرية للفراغ ، ويجب أن نقبل به كما تعطيه المسلمة الثالثة (الجزء II منها)

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2}\sum_\alpha \frac{1}{m_\alpha}\nabla_\alpha^2 + V(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \ldots) \qquad (9.4)$$

يمثل المؤثر الاول في الطرف الثاني الطاقة الحركية ويمثل الثاني الطاقة الكامنـة واثره في تابع موجي هو ضربه بـ V . تدعى المعادلة الخاصة لـ $\hat{H}$ **معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن**

$$\hat{H}\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\underline{r})\right]\psi = E\psi \qquad (9.5)$$

واما معادلة شرودنجر التابعة للزمن فهي تعطى بالمعادلة (2.4) حيث ان $\hat{H}$ معين بالعلاقة (9.5) .

سوف نقدم فيما تبقى من هذا البحثتبريرا لشكل مؤثر هاميلتون الذى قبلنا به تسليما . من اجل جسيم حر تقبل معادلة شرودنجر حلولا محدودة من اجل $E \geqslant 0$ ،وتكون التوابع الخاصة للطاقة الحركية

$$\psi = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \underline{P}.\underline{r})} \qquad (E = P^2/2m) \tag{9.6}$$

ويصف كل تابع من هذا الشكل حالة للجسيم تكون طاقته فيها E ودفعه $\underline{P}$. وطيف الطاقة الحركية مستمر ويغمر المجال ($[0, \infty$) وكل قيمة للطاقة متحللة من مرتبة غير منتهية ،اذ انه يوجد عدد غير منته من التوابع(9.6)تشترك ب E ولكنها تختلف باتجاه $\underline{P}$. وينطبق هذا مع الوصف الكلاسيكي للحركة .

لننظر الان الى النتائج التي نتوصل اليها بالانتقال الى النهاية الكلاسيكية لمعادلة شرودنجر . بالتعويض بالتابع الموجي شبه الكلاسيكي (1.1) في معادلة شرودنجر (9.5)نجد

$$a\frac{\partial S}{\partial t} - i\hbar\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m}a\nabla^2 S - \frac{i\hbar}{m}\nabla S.\nabla a - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 a + Va = 0 \tag{9.7}$$

وبمساواة القسمين الحقيقي والتخيلي لهذه المعادلة بالصفر نجد

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 a = 0 \tag{9.8}$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m}\nabla^2 S + \frac{1}{m}\nabla S.\nabla a = 0 \tag{9.9}$$

وباهمال الحد الحاوي على $\hbar^2$ في المعادلة الاولى نحصل على

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V = 0$$

وهي معادلة هاميلتون جاكوبي للفعل S المتعلق بجسيم كما الفناها في الميكانيك الكلاسيكي .

تكتب المعادلة الثانية بعد ضربها ب $2a$ بالصورة

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + div\left(a^2\frac{\nabla S}{m}\right) = 0 \tag{9.10}$$

وهذه المعادلة هي معادلة الاستمرار ،اذ ان $a^2 = |\psi|^2 = \rho$ هي كثافة احتمال وجود الجسيم عند نقطة في الفراغ و $\nabla S/m$ هي السرعة الكلاسيكية $\underline{v}$ للجسيم . وهي تبين ان الكثافة الاحتمالية تسري تبعا لقوانين الميكانيك الكلاسيكي بسرعة كلاسيكية $\underline{v}$ عند كل نقطة . وهذه المعادلة هي النهاية الكلاسيكية لمعادلة الاستمرار (V.6.2) التي تُعطى فيها كثافة التيار الاحتمالي $\underline{j}$ بالعلاقة (V.6.6) . وبالفعل وبتعويض ψ في (V.6.6) بشكله شبه الكلاسيكي نحصل على كثافة التيار الاحتمالي تماما كما يعطى في الميكانيك الكلاسيكي $\underline{j} = \rho \underline{v}$.

١٠ § . موٌثر القلب والتماثل

بالاضافة الى سحب المحاور الاحداثية وتدويرها ،هنالك تحويل آخر يترك هاميلتوني جملة عدة جسيمات ليست في حقل خارجي دون تغيير . وهذا التحويل هو تحويل القلب

$$(x, y, z) \xrightarrow{T} (-x, -y, -z) \qquad (10.1)$$

في الميكانيك الكلاسيكي لا يوٌدي لا تغير الهاميلتوني تحت تحويل القلب الى اي قانون انحفاظ ،ولكن الامر يختلف في ميكانيك الكم . لنرمز لموٌثر القلب بالرمز I_{nv}، وأثره في تابع موجي هو تغيير اشارة كل الاحداثيات فيه

$$I_{nv}\, \psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_n) = \psi(-\underline{r}_1, -\underline{r}_2, \dots, -\underline{r}_n) \qquad (10.2)$$

تحسب القيم الخاصة للموٌثر I_{nv} بسهولة من معادلته الخاصة

$$I_{nv}\, \psi = \epsilon\, \psi$$

بتطبيق I_{nv} على طرفي المعادلة الاخيرة نجد من ناحية اولى

$$I_{nv}^2\, \psi = \epsilon\, I_{nv}\, \psi = \epsilon^2 \psi$$

ومن ناحية ثانية يجب ان نحصل في المعادلة السابقة على التابع ψ نفسه مادام تغير كل الاشارات في ψ مرتين متعاقبتين يكافىء الموٌثر المطابق ($I_{nv}^2 = I$) . ينتج اذن ان

$$\epsilon^2 = 1 \Rightarrow \epsilon = \pm 1 \qquad (10.3)$$

ولذلك فاما ان تغير توابع Inv الخاصة اشاراتها تحت تأثير Inv او أن لا تغيرها. بعبارة ثانية ان التوابع الخاصة لـ Inv هي مجموعة التوابع الموجية المتناظرة اوضد المتناظرة بالنسبة لجميع متحولاتها المكانية . تكون توابع Inv الخاصة المقابلة للقيمة الخاصة $+1$ (-1) متناظرة (ضد متناظرة) ويقال انها ذات تماثل زوجي (فردي) .

يعني لا تغير الهاميلتوني تحت موئثر القلب أن $[\hat{H}, Inv] = 0$ ، ويدل هذا على انه يمكن اختيار توابع خاصة آنية لموئثر هاميلتون وللموئثر Inv ،أي انه يمكن ان نقتصر على التوابع الخاصة للطاقة والمتماثلة زوجيا او فرديا . هذا وبما أن Inv ثابت للحركة لذلك تبقى قيمته الخاصة محفوظة ، واذا كان ψ تابع خاص له وكان تماثله في لحظة ما $+1$ مثلا فانه يبقى كذلك بمرور الزمن .بعبارة ثانية تحافظ توابع الحالةالزوجية والفردية على تناظرها او ضد تناظرها بمرور الزمن .

<u>جمع التماثل :</u>

نعلم ان التابع الموجي ψ لجملة تتألف من قسمين لا يتبادلان التأثير هو جداء التابعين الموجيين للقسمين: ψ_1 و ψ_2 . ومن الواضح انه اذا كان لهذين التابعين التماثل نفسه فان التابع الموجي ψ للجملة ككل يكون زوجيا ،واذا كان تماثلا التابعين ψ_1 و ψ_2 مختلفين فان التابع الموجي للجملة يكون فرديا .

يمكن تعميم هذه القاعدة من اجل جملة موئلفة من n قسما لا تتبادل التأثير فيما بينها . اذا كانت حالات هذه الاجزاء محددة التماثل ومعينة بالقيم الخاصة الموافقة $\varepsilon_i = \pm 1$ ،فان تماثل حالة كل الجملة ε يعطى بالعلاقة

$$\varepsilon = \varepsilon_1 \varepsilon_2 \cdots \varepsilon_n \qquad (10.9)$$

تنطبق القاعدة السابقة ايضا على جملة موئلفة من جسيم واحد يمكن فصل تابعه الموجي الى اجزاء تتعلق بمتحولات مختلفة .

تمرين ١ : برهن على ان تماثل الحالة $\psi_n(x)$ للهزاز البسيط التوافقي هو $\varepsilon = (-1)^n$

تمرين 2 : برهن على أن تماثل الحالة

$$\psi_{qr}(x,y) = \psi_q(x)\,\psi_r(y) \qquad (10.5)$$

للهزاز التوافق الثنائي البعد يساوى جداء تماثلي الحالتين ψ_q و ψ_r . برهن بالتالي ان هذا التماثل يتعلق بالمجموع $q+r$ وأنه يساوى $(-1)^{q+r}$.

تمرين 3 : تعطى التوابع الخاصة لمربع العزم الحركي $\hat{L}^2$ ولمركبته $\hat{L}_z$ بالعلاقة

$$Y_{\ell m} = c\,e^{im\phi}\,\frac{1}{\sin^m\theta}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{\ell-m}\sin^{2\ell}\theta \qquad (10.6)$$

حيث ان ℓ العدد الكمي المدارى وهو يعين طويلة $\underline{\hat{L}}$ ، و m العدد الكمي المغناطيسي ويعين مركبة $\underline{L}$ على المحور z ، و ℓ و m عددان صحيحان . عيّن تماثل الحالات $Y_{\ell m}$.

الحل : يأخذ تحويل القلب

$$(x,y,z) \longrightarrow (-x,-y,-z)$$

في الاحداثيات القطبية ، الشكل

$$(r,\phi,\theta) \longrightarrow (r,\pi+\phi,\pi-\theta) \qquad (10.7)$$

وباجراء هذا الاستبدال في $Y_{\ell m}$ نجد ان $e^{im\phi}$ يُضرَب ب $(-1)^m$ وأن العامل الاخر يُضرَب ب $(-1)^{\ell-m}$ ، واستنادا الى هذا نرى أن $Y_{\ell m}$ يُضرَب ب $(-1)^{\ell}$.
اذن فتماثل هذه الحالة هو $\varepsilon = (-1)^{\ell}$. ونستنتج ان الحالات الموافقة لقيم زوجية لـ ℓ ذات تماثل زوجي وأن الحالات الموافقة لقيم فردية لـ ℓ ذات تماثل فردى ، وذلك مهما تكن قيمة m .

تمرين 4 : عيّن تماثل الحالات الخاصة لذرة الهيدروجين

$$\psi_{n\ell m} = R_{n\ell}(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\phi) \qquad (10.8)$$

حيث ان $Y_{\ell m}$ معطى بالعلاقة (10.6) .

تمرين 5 : برهن على ان المؤثر Inv هرميتني ، أى

$$\langle \psi | Inv\,\varphi \rangle = \langle Inv\,\psi | \varphi \rangle \qquad \forall \psi,\varphi \qquad (10.9)$$

تمرين 6 : برهن على أن

$$[\hat{I}_{nv}, \hat{L}_x] = [\hat{I}_{nv}, \hat{L}_y] = [\hat{I}_{nv}, \hat{L}_z] = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{I}_{nv}] = 0$$

* * *

الفصل الثامن

العزم الحركي الزاوي

١٥ . مؤثرات العزم الحركي

لنفرض أن جسيماً يتحرك بالنسبة الى جملة احداثية ديكارتية متعامدة $Oxyz$. يعطى العزم الحركي لهذا الجسيم حول المبدأ بالعلاقة

$$\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$$

حيث $\underline{r}$ شعاع موضعه و $\underline{p}$ دفعه . باسقاط هذه العلاقة على المحاور الاحداثية نجد مركبات العزم الحركي

$$L_x = y p_z - z p_y \ , \ L_y = z p_x - x p_z \ , \ L_z = x p_y - y p_x$$

باستخدام التمثيل الاحداثي (تمثيل شرودنجر) نجد المؤثرات الكوانتية المقابلة لمركبات العزم الحركي :

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar\,(y\,\partial/\partial z - z\,\partial/\partial y) \\ \hat{L}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar\,(z\,\partial/\partial x - x\,\partial/\partial z) \\ \hat{L}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar\,(x\,\partial/\partial y - y\,\partial/\partial x) \end{aligned} \qquad (1\cdot1)$$

برهنا من قبل (III § (5.3)) على ان هذه المؤثرات هرميتية .

خلافا لمركبات الدفع التي تقبل القياس معا نلاحظ ان مركبات العزم الحركي غير متآلفة ، أى أن المؤثرات الموافقة لا تقبل التبديل فيما بينها . بالحقيقة تحقق مؤثرات العزم الحركي العلاقات التبادلية :

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \ , \ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \ , \ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y \qquad (1\cdot2)$$

نستنتج من هذه العلاقات أنه يمكن اجراء قياس دقيق لاحدى المركبات فقط. يعطى مربع قياس شعاع العزم الحركي الكلاسيكي بالعلاقة

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

نعرف المؤثر المقابل لهذا الملحوظ بالعلاقة

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \qquad (1.3)$$

نسمي $\hat{L}^2$ مؤثر مربع العزم الحركي (اذا لم يكن ثمة التباس قد نقول احيانا مؤثر العزم الحركي فقط) . بالاستناد الى العلاقات التبادلية (1.2) يمكن البرهان على أن مربع العزم الحركي يتآلف مع جميع مركبات شعاع العزم الحركي

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \qquad (1.4)$$

ينتج من (1.2) و (1.4) أنه يمكن في آن واحد قياس العزم الحركي مع واحدة فقط من مركباته .

تمرين 1 : برهن على أن

$$[\hat{L}_x, \hat{p}_x] = 0 \ , \ [\hat{L}_x, \hat{p}_y] = i\hbar \hat{p}_z \ , \ [\hat{L}^2, \hat{p}_z] = -i\hbar \hat{p}_y$$

البرهان على العلاقة الثانية :

$$[\hat{L}_x, \hat{p}_y]\psi = (\hat{L}_x \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{L}_x)\psi$$

$$= -\hbar^2 (y\partial_z - z\partial_y)(\partial_y \psi) + \hbar^2 \partial_y (y\partial_z - z\partial_y)\psi$$

$$= -\hbar^2 (y\partial^2_{zy}\psi - z\partial^2_{yy}) + \hbar^2 (\partial_z \psi + y\partial^2_{yz}\psi - z\partial^2_{yy}\psi)$$

$$= i\hbar(-i\hbar\partial_z \psi) = i\hbar \hat{p}_z \psi$$

يتم البرهان على العلاقتين الاولى والثالثة بصورة مماثلة . (برهن على هاتين العلاقتين باستخدام خواص المبادل) .

تمرين 2 : برهن على أن

$$[\hat{L}_x, \hat{x}] = 0 \ , \ [\hat{L}_y, \hat{y}] = i\hbar \hat{z} \ , \ [\hat{L}_x, \hat{z}] = -i\hbar \hat{y}$$

البرهان على العلاقة الثالثة

$$
\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{z}] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}] \\
&= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}] \\
&= y[p_z, z] + [y, z]p - z[p_y, z] - [z, z]p_y \\
&= y(-i\hbar) + 0 - 0 - 0 = -i\hbar y
\end{aligned}
$$

يجري البرهان على العلاقتين الاولى والثانية بطريقة مماثلة .

تمرين 3 : بالاستناد الى نتائج التمرينين السابقين ، برهن على صحة العلاقات التبادلية (1.2) .

$$
\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{L}_x, zp_x - xp_z] \\
&= [\hat{L}_x, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{L}_x, \hat{x}\hat{p}_z] \\
&= z[L_x, p_x] + [L_x, z]p_x - [L_x, x]p_z - x[L_x, p_z] \\
&= 0 - i\hbar yp_x - 0 - x(-i\hbar\hat{p}_y) \\
&= i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar\hat{L}_z
\end{aligned}
$$

يبرهن على العلاقتين الثانية والثالثة بالطريقة نفسها .

تمرين : برهن على صحة العلاقات (1.4)

$$
\begin{aligned}
[\hat{L}^2, \hat{L}_x] &= [\hat{L}_x^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] \\
&= 0 + \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x]\hat{L}_y + \hat{L}_z[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_z \\
&= \hat{L}_y(-i\hbar\hat{L}_z) + (-i\hbar\hat{L}_z)\hat{L}_y + \hat{L}_z(i\hbar\hat{L}_y) + (i\hbar\hat{L}_y)\hat{L}_z \\
&= 0
\end{aligned}
$$

يجرى البرهان على العلاقتين الثانية والثالثة بطريقة مماثلة .

2§. مؤثرا البناء والهدم والقيم الخاصة بـ $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$

مادامت المركبة $\hat{L}_z$ متآلفة مع مؤثر العزم الحركي ، اذن يملك المؤثران $\hat{L}_z$ و

و $\hat{L}^2$ المجموعة نفسها من التوابع الخاصة . ليكن ψ أحد هذه التوابع الخاصة المشتركة. لدينا اذن

$$\hat{L}^2 \psi = a\psi \quad (2.1)$$

$$\hat{L}_z \psi = b\psi \quad (2.2)$$

يتضح من العلاقة (1.3) ان القيمتين المتوقعتين للعزم الحركي ولمركبته $\hat{L}_z$ تحققان العلاقة

$$\langle \hat{L}^2 \rangle \geqslant \langle \hat{L}_z^2 \rangle$$

بما ان الجملة المفترضة في الحالة الخاصة ψ اذن فالقيمة المتوقعة للملحوظ هي القيمة الخاصة به . واستنادا اليه يكون

$$a \geqslant b^2 \quad (2.3)$$

نعرّف الآن مؤثرين يلعبان دوراً مماثلاً لمؤثري البناء والهدم المشار اليهما في بحث الهزاز التوافقي

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \quad , \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y \quad (2.4)$$

وبالاعتماد على التعريف (2.4) والعلاقات التبادلية (1.2) نبرهن على أن

$$\hat{L}_\pm L_\mp = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \pm \hbar \hat{L}_z \quad (2.5)$$

$$[\hat{L}_z , \hat{L}_\pm] = \pm \hbar L_\pm \, . \quad (2.6)$$

ومن (2.6) نجد

$$L_z L_\pm = L_\pm L_z \pm \hbar \hat{L}_\pm \quad (2.7)$$

وبشكل خاص يكون

$$\hat{L}_z \hat{L}_+ \psi = \hat{L}_+ \hat{L}_z \psi + \hbar L_+ \psi$$

بما ان ψ تابع خاص لـ $\hat{L}_z$ ، نجد من (2.2) ومن العلاقة السابقة

$$\hat{L}_z (\hat{L}_+ \psi) = (b+\hbar)(\hat{L}_+ \psi) \quad (2.8)$$

وهي معادلة خاصة جديدة تابعها الخاص ($L_+\psi$) وقيمتها الخاصة ($b+\hbar$) . بضرب العلاقة (2.1) من الجهة اليسرى بالمؤثر $\hat{L}_+$ والاستفادة من كون $\hat{L}^2$ متآلفا مع جميع مركبات $\hat{\underline{L}}$ نجد

$$\hat{L}_+(\hat{L}^2\Psi) = \hat{L}_+(a\Psi)$$

$$\Rightarrow \quad \hat{L}^2(\hat{L}_+\Psi) = a(\hat{L}_+\Psi) \tag{2.9}$$

يتصف المؤثر $\hat{L}_+$ اذن بالخاصة التالية : عندما يؤثر $\hat{L}_+$ في تابع خاص مشترك لـ $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ فانه يولد تابعا خاصا مشتركا جديدا ($L_+\Psi$) تبقى من اجله القيمة الخاصة لـ $\hat{L}^2$ دون تغيير على حين تزداد القيمة الخاصة لـ $\hat{L}_z$ بمقدار $\hbar$. لكن لا يمكن b ان تزداد دون حد لئلا تختل المتراجحة (2.3) . لنفرض أن $\ell\hbar$ هي اكبر قيمة لـ b تتحقق بها المتراجحة (2.3) وليكن Ψ هو التابع الخاص الموافق لهذه القيمة العظمى لـ b . أي

$$\hat{L}_z\Psi = \ell\hbar\Psi$$

ماذا يحدث الان لو ضربنا طرفي (2.2) من الجهة اليسرى بـ $\hat{L}_+$ ؟ بحسب خواص $\hat{L}_+$ نجد قيمة خاصة جديدة $(\ell+1)\hbar$ وتابعا خاصا جديدا $(\hat{L}_+\Psi)$ للملحوظ $\hat{L}_z$. لكن هذا يعني ان المتراجحة (2.3) قد اختلت . كيف لنا اذن ان نخرج من هذا الاشكال ؟ .

ان الاجابة عن هذا السؤال بسيطة ، فاذا انعدم ($\hat{L}_+\Psi$) بقيت المتراجحة (2.3) محققة لأن $(\ell+1)\hbar$ تقابل التابع الصفر ($L_+\Psi$) ، فهي لا تمثل قيمة خاصة بـ $\hat{L}_z$ ولا يمثل التابع هذا ايضا تابعا خاصا (ومن ناحية فيزيائية لا يمثل هذا التابع جسيما موجودا) . اذن فيجب ان يكون

$$\hat{L}_+\Psi = 0 \tag{2.10}$$

وبضرب المعادلة الاخيرة بـ $\hat{L}_-$ والاستفادة من (2.5) نجد

$$0 = \hat{L}_-\hat{L}_+\Psi = (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z)\Psi$$

$$= (a - \hbar^2\ell^2 - \hbar^2\ell)\Psi$$

$$\Rightarrow \quad a = \ell(\ell+1)\hbar^2 \tag{2.11}$$

حصلنا على العلاقة السابقة بين a والقيمة العظمى $\ell\hbar$ لـ b بالاعتماد على أن b محدودة من الاعلى . لتعيين $\ell\hbar$ و a يجب ان نجد علاقة ثانية بينهما . تنتج العلاقة الثانية من وجود قيمة دنيا لـ $\hat{L}_z$ تتحقق بها (2.3) . من (2.7) نجد

$$\hat{L}_z \hat{L}_- \psi = \hat{L}_- \hat{L}_z \psi - \hbar \hat{L}_- \psi$$

$$\Rightarrow \hat{L}_z (\hat{L}_- \psi) = (\ell - 1)\hbar \, (\hat{L}_- \psi)$$

بتكرار الضرب n مرة نجد المعادلة الخاصة

$$\hat{L}_z (\hat{L}_-^n \psi) = (\ell - n)\hbar \, (\hat{L}_-^n \psi)$$

التي تكتب بالشكل

$$\hat{L}_z \varphi = (\ell - n)\hbar \, \varphi \qquad (2.12)$$

حيث

$$\varphi = \hat{L}_-^n \psi \qquad (2.13)$$

بالاستفادة من أن $\hat{L}^2$ يتآلف مع $\hat{L}_-$ ، وبضرب (2.1) n مرة بـ $\hat{L}_-$ نجد

$$\hat{L}^2 (\hat{L}_-^n \psi) = a (\hat{L}_-^n \psi) \qquad (2.12)'$$

يمكن مربع $(\ell - n)\hbar$ ان يزداد دون حد وذلك بجعل n كبيرة بما فيه الكفاية مما يودي به الى تجاوز a . بناء على هذا يجب ان توجد قيمة عظمى لـ n تتحقق بها المتراجحة (2.3) . لنفرض أن n هي هذه القيمة العظمى، عندئذ وبتطبيق $\hat{L}_-$ على φ نجد التابع

$$L_- \varphi = 0 \qquad (2.14)$$

بضرب هذه المعادلة بـ $\hat{L}_+$ والاستفادة من (2.5) و(2.12) و(2.12)' نجد

$$0 = \hat{L}_+ \hat{L}_- \varphi = (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z) \varphi$$

$$= \{ a - (\ell - n)^2 \hbar^2 + (\ell - n)\hbar^2 \} \varphi$$

$$\Rightarrow a = (\ell - n)^2 \hbar^2 - (\ell - n)\hbar^2 \qquad (2.15)$$

بحذف a بين (2.11) و(2.15) نجد

$$\ell = \frac{1}{2} n \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

يمكن ℓ اذن ان تأخذ القيم الصحيحة الموجبة وانصا فها . لكن ،سنرى قريبا أن قيم ℓ الموافقة للعزم الحركي المداري (الناتج من الحركة الدورانية) هي أعداد صحيحة فقط ،اى :

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{2.16}$$

أما سبب ظهور أنصاف الاعداد الفردية الموجبة فيعزى الى العزم الذاتي او السبين وسوف نتحدث عن هذا في حينه . الان وبتعويض قيمة ℓ المعطاة ب (2.16) في (2.11) نجد

$$a = \ell(\ell+1)\hbar^2 \qquad \ell = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{2.17}$$

ذكرنا ان قيم $\hat{L}_z$ تتغير بواحدات قدرها $\hbar$ وبما ان قيمة $\hat{L}_z$ العظمى هي عدد صحيح موجب من $\hbar$ اذن فقيمه الممكنة هي واحدات صحيحة من $\hbar$. اذا اجرينا قياسا مشتركا ل $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ نجد بنتيجة القياس قيمة ل $\hat{L}^2$ ولتكن مثلا

$$L^2 = \ell(\ell+1)\hbar^2 \qquad (\ell \text{ عدد صحيح غير سالب })$$

وبنتيجة القياس ايضا نحصل على قيمة ل $\hat{L}_z$ مساوية لعدد صحيح من $\hbar$. لكن قيمة $\hat{L}_z$ هذه لا يمكن ان تتجاوز $\ell\hbar$ ولا ان تقل عن $-\ell\hbar$. اذن فقيم $\hat{L}_z$ الممكنة هي

$$L_z = m_\ell \hbar \qquad m_\ell = -\ell, -\ell+1, \ldots, 0, \ldots, \ell$$

لنرمز الى التابع الخاص المشترك ل $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ بالرمز $\psi_{\ell m_\ell}$ فيكون لدينا :

$$\hat{L}^2 \psi_{\ell m_\ell} = \ell(\ell+1)\hbar^2 \psi_{\ell m_\ell} \tag{2.18}$$

$$\hat{L}_z \psi_{\ell m_\ell} = m_\ell \hbar \psi_{\ell m_\ell} \tag{2.19}$$

يشير الدليل ℓ المُثبّت كدليل ل m الى ان مجال تحول الأخير يتعلق ب ℓ ، وبالفعل وكما نعلم

$$-\ell \le m_\ell \le \ell \tag{2.20}$$

ذكرنا ان مركبة واحدة فقط من مركبات $\hat{\underline{L}}$ يمكن قياسها في آن واحد مع $\hat{L}^2$

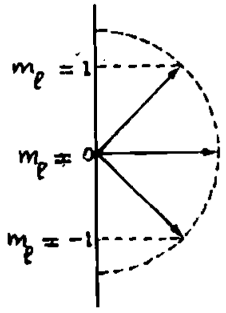
أما اعتبار $\hat{L}_z$ فهو محض اختيار ، فمن الممكن اختيار أية مركبة اخرى مثل $\hat{L}_x$ أو $\hat{L}_y$.
بالحقيقة قد نحتاج الى قياس $\hat{L}^2$ ومركبة شعاع العزم الحركي في اتجاه ما δ ،
ولذلك نختار oz منطبقا على δ ونُجري عملية قياس متواقت للملحوظين $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$.
تُحضِّر عملية القياس الجملة المفترضة في حالة توصف بتابع موجي من الشكل $\psi_{\ell m_\ell}$ ،
حيث ان $\ell(\ell+1)\hbar^2$ هي نتيجة قياس $\hat{L}^2$ و $m_\ell\hbar$ هي نتيجة قياس $\hat{L}_z$. بالطبع
يمكن ان تكون قيمة $\hat{L}_z$ أية قيمة صحيحة من $\hbar$ بين $-\ell\hbar$ و $+\ell\hbar$.

يبيّن (ش . 1) الطريقة التي سلكناها في ايجاد قيم $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$.

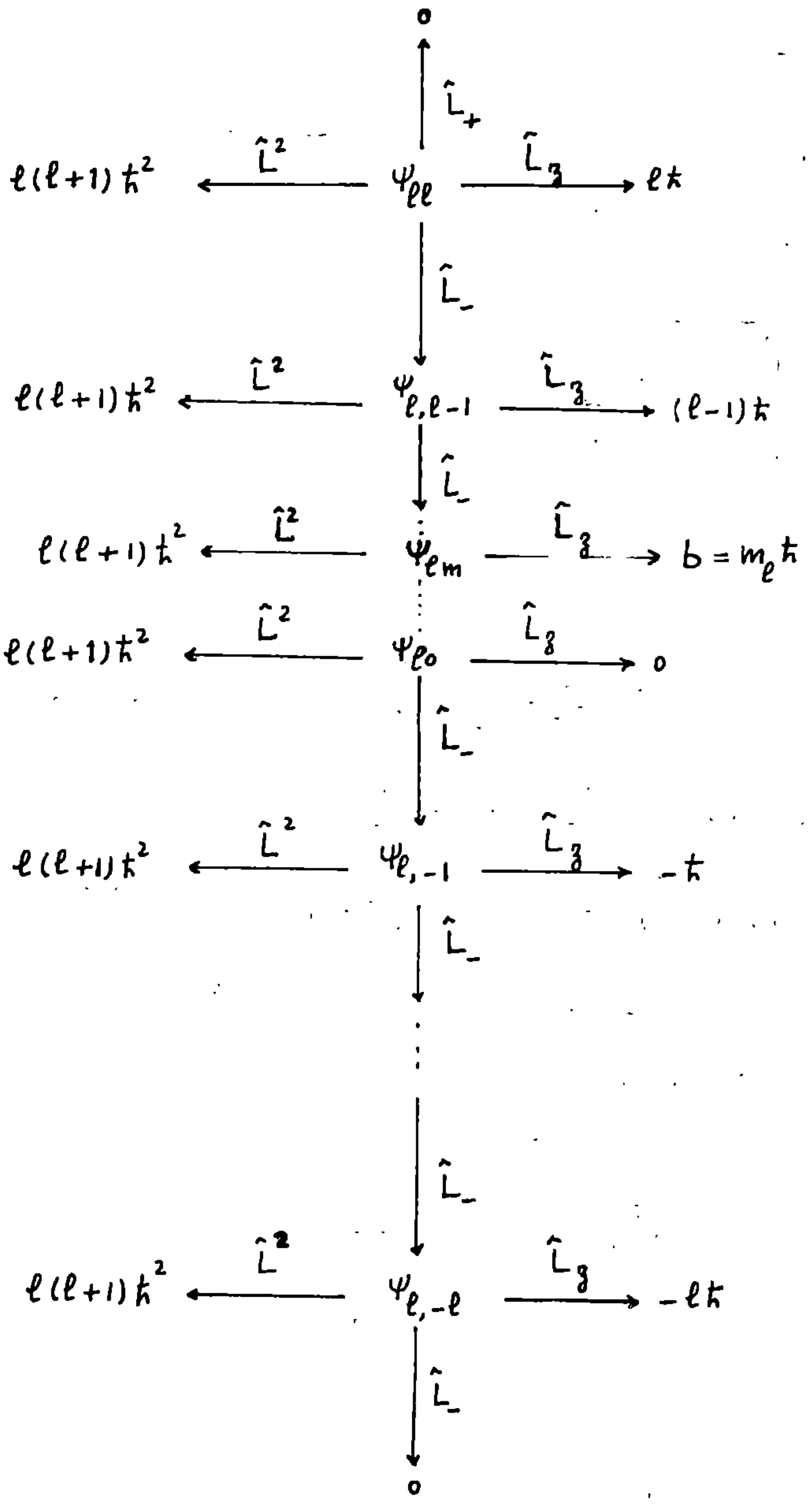
من المفيد ان نمثل نتائج الفقرة الأخيرة هندسيا . بنتيجة قياس مشترك لـ $\hat{L}^2$
و $\hat{L}_z$ تتحدد قيمة للعدد ℓ ولتكن $\ell=2$ مثلا . يساوى عندئذ قياس شعاع
العزم الحركي $\sqrt{2(2+1)}\hbar=\sqrt{6}\hbar$ ، فهو يقع اذن على محيط دائرة نصف قطرها $\sqrt{6}\hbar$. يتعين
اتجاهه بمعرفة مركبته في الاتجاه المختار oz وهي تساوى $m_\ell\hbar$ حيث يمكن أن m
يأخذ احدى القيم $-2,-1,0,1,2$. اذن هنالك خمسة اتجاهات يمكن أن يأخذها
$\hat{\underline{L}}$.

بالطبع تملي معرفة المركبة $\hat{L}_z$ على الشعاع $\hat{\underline{L}}$ أن يقع على مخروط يقع رأسه
في الجسيم المعتبر وارتفاعه يساوى $|m_\ell|\hbar$. اذن فما رسمناه هو تمثيل مستو لشكل
فراغي ينتج من دوران الشكل المرسوم حول المحور oz . يسمى ℓ العدد الكمي
المدارى ويسمى m_ℓ العدد الكمي المغناطيسي . وسوف نشرح اسباب التسميتين
في الباب اللاحق .

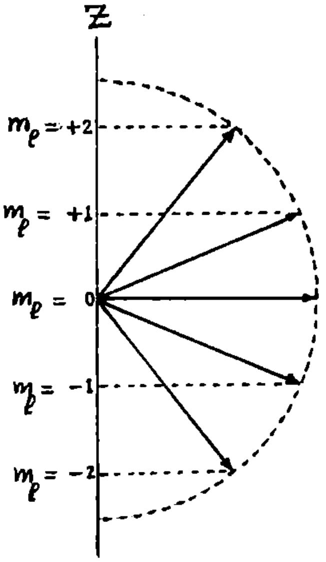
تمرين 1 . تحقّق من صحة العلاقة $\langle \hat{\underline{L}}^2 \rangle \geq \langle \hat{L}_z \rangle^2$



الاتجاهات الممكنة للعزم الحركي من
اجل $\ell=1$



(ش . 1) مخطط للطريقة المسلوكة في ايجاد قيم $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$



الاتجاهات الممكنة للعزم الحركـــي
من اجـل $\ell = 2$

(ش . 2)

$$\langle \hat{L}^2 \rangle = \langle \Psi | (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2)\, \Psi \rangle$$ (تعريف القيمة المتوقعة)

$$= \langle \Psi | \hat{L}_x^2 \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{L}_y^2 \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{L}_z^2 \Psi \rangle$$ (الجداء الداخلي جمعي)

$$= \langle \hat{L}_x \Psi | \hat{L}_x \Psi \rangle + \langle \hat{L}_y \Psi | \hat{L}_y \Psi \rangle + \langle \hat{L}_z \Psi | \hat{L}_z \Psi \rangle$$ (مركبات $\hat{L}$ هرمينية)

(الجداء الداخلي موجب)
$$\geqslant \langle L_z \Psi | L_z \Psi \rangle$$
$$= \langle \Psi | \hat{L}_z^2 \Psi \rangle = \langle \hat{L}_z^2 \rangle_\Psi \, .$$

تمرين 2 . برهن على العلاقتين (2.5)و(2.6) .

$$\hat{L}_+ \hat{L}_- = (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)$$
$$= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - i(\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x)$$
$$= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - i(i\hbar \hat{L}_z)$$
$$= \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z$$

وكذلك يُبرهَن على العلاقة الثانية في (2.5) . اما بالنسبة الى (2.6) فلدينا

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_+] = [\hat{L}_z, \hat{L}_x + i\hat{L}_y]$$
$$= [\hat{L}_z, \hat{L}_x] + i[\hat{L}_z, \hat{L}_y]$$
$$= i\hbar \hat{L}_y + \hbar \hat{L}_x$$
$$= \hbar \hat{L}_+$$

وبالمثل يبرهن على العلاقة الثانية في (2.6) .

3 . موئثرات العزم الحركي في الاحداثيات القطبية

ترتبط الاحداثيات القطبية (r, ϕ, θ) بالاحداثيات الديكارتية (x ، y ، z) بالعلاقات

$$x = r \sin\theta \cos\phi$$
$$y = r \sin\theta \sin\phi \qquad (3.1)$$
$$z = r \cos\theta$$

بالاستفادة من علاقات التحويل هذه يمكن ان نعبر عن مركبات العزم الحركي (1.1) بدلالة الاحداثيات القطبية

$$\hat{L}_x = -i\hbar(-\sin\phi\, \partial/\partial\theta - \cos\phi \cot\theta\, \partial/\partial\phi)$$
$$\hat{L}_y = -i\hbar(\cos\phi\, \partial/\partial\theta - \sin\phi \cot\theta\, \partial/\partial\phi) \qquad (3.2)$$
$$\hat{L}_z = -i\hbar\, \partial/\partial\phi$$

استنادا الى هذه التعابير يكتب $\hat{L}_+$ و $\hat{L}_-$ المعرفين بالعلاقة (2.4) كما يلي :

$$\hat{L}_\pm = \hbar e^{\pm i\phi}(\pm \partial/\partial\theta + i \cot\theta\, \partial/\partial\phi) \qquad (3.3)$$

كما يكتب $\hat{L}^2$ استنادا الى التعابير نفسها على الصورة

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\} \qquad (3.4)$$

تمرين . تحقق من صحة العلاقات (3.2) .

الحلّ : بحسب قاعدة اشتقاق التابع المركب ومن علاقات التحويل (3.1)

$$\frac{\partial}{\partial\theta} = \frac{\partial x}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial z}$$

$$= r\cos\theta\cos\phi\,\partial/\partial x + r\cos\theta\sin\phi\,\partial/\partial y - r\sin\theta\,\partial/\partial z$$

$$\frac{\partial}{\partial\phi} = \frac{\partial x}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$= -r\sin\theta\sin\phi\,\partial/\partial x + r\sin\theta\cos\phi\,\partial/\partial y$$

بتعويض قيم $\partial/\partial\theta$ و $\partial/\partial\phi$ في عبارة $\hat{L}_x$ في (3.2) والاصلاح نجد

$$\hat{L}_x = -i\hbar\,(-r\cos\theta\,\partial/\partial y + r\sin\theta\sin\phi\,\partial/\partial z)$$

بالاستفادة من علاقات التحويل (3.1) نقع على النتيجة

$$\hat{L}_x = -i\hbar\,(y\,\partial/\partial z - z\,\partial/\partial y)$$

تمرين 2 . تحقق من صحة العلاقتين (3.3) و (3.4) .

§ 4 . التوابع الخاصة للعزم الحركي

لا يتعين التابع الموجي بشكل كامل عندما تتحدد قيم $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$. يمكن ان نرى هذا من عبارتي المؤثرين في الاحداثيات القطبية اللتين تتعلقان ب θ و ϕ فقط، وعليه يمكن لتوابعهما الخاصة المشتركة أن تحتوى على عامل ضرب كيفي في r . أى تأخذ توابعهما الخاصة المشتركة الشكل

$$\psi_{\ell m_\ell}(x,y,z) = R(r)\,Y_{\ell m_\ell}(\theta,\phi) \qquad (4.1)$$

تأخذ عبارة عنصر الحجم $dx\,dy\,dz$ في الاحداثيات القطبية الصيغة $r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi$، وعليه يكون شرط استنظام $\psi_{\ell m}$

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |Y_{\ell m}|^2 \sin\theta\, d\theta\, d\phi = 1 \qquad (4.2)$$

سوف نهتم هنا فقط بالجزء الزاوي من التابع الموجي والذى يميز التوابع الخاصة للعـزم الحركي ، ولذلك يمكن اختيار R من اجل اهتماماتنا الحالية اى تابع يجعل التكامل الاوٌل مساويا للواحد . وعليه يصبح شرط استنظام الجزء الزاوي

$$\langle Y|Y\rangle = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |Y|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi = 1 \qquad (4.3)$$

حيث ان $\sin\theta \, d\theta d\phi$ هو عنصر من زاوية مجسمة .

نكتب الان العلاقة (2.19) على الصورة

$$\hat{L}_z Y_{\ell m}(\theta,\phi) = m\hbar Y_{\ell m}(\theta,\phi) \qquad (4.4)$$

وبحسب العلاقة الثالثة من (3.2) نجد

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} Y_{\ell m}(\theta,\phi) = m\hbar Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

التي تعطي بالمكاملة

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = c\, e^{im\phi}\, \Theta_{\ell m}(\theta) \qquad (4.6)$$

حيث $\Theta_{\ell m}(\theta)$ تابع في θ يجب تعيينه . يظهر من العلاقة السابقة ان القيم الخاصة لـ $\hat{L}_z$ هي بالفعل اعداد صحيحة وليس مطلقا انصافها . حيث إن $Y_{\ell m}$ وحيد التعيين اذن

$$Y_{\ell m}(\theta,0) = Y_{\ell m}(\theta,2\pi) \quad , \qquad (4.7)$$

ومن (4.7) و (4.6) نجد

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots . \qquad (4.8)$$

حيث ان m صحيحة فالقيمة العظمى لها وهي ℓ صحيحة إيضا وموجبة ،أى $(\ell = 0, 1, 2, \ldots)$. نأخذ $c = 1/\sqrt{2\pi}$ ،يصبح العامل المتعلق بـ ϕ الـذى يميز التوابع الخاصة لـ $\hat{L}_z$

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \qquad (4.9)$$

هذه التوابع مستعمدة مستنظمة بالمعنى

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^* \Phi_{m'} \, d\phi = \delta_{mm'} \qquad (4.10)$$

سوف نرى أن مسألة تحديد التوابع الخاصة المشتركة لـ $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ تقبل فصل المتحولات θ و ϕ ، ولذلك نبحث عن توابع خاصة من الشكل

$$Y_{\ell m} = \Phi_m(\phi)\, \Theta_{\ell m}(\theta) \qquad (4.11)$$

بما أن التوابع الخاصة $\Phi_m(\phi)$ لـ $\hat{L}_z$ مستنظمة بالعلاقة (4.10) فيكون شرط استنظام $\Theta_{\ell m}$ بحسب (4.3)

$$\int_0^{\pi} |\Theta_{\ell m}(\theta)|^2 \sin\theta \, d\theta = 1 \qquad (2.12)$$

ان التوابع $Y_{\ell m}$ متعامدة

$$\langle Y_{\ell m} | Y_{\ell' m'} \rangle = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \qquad (4.13)$$

لأنها توابع خاصة لـ $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ ، وكذلك التوابع Φ_m متعامدة فيما بينها لأنها توابع خاصة لـ $\hat{L}_z$. اما التوابع $\Theta_{\ell m}$ فهي ليست توابع خاصة لأي من موثري العزم الحركي وهي متعامدة من أجل قيمتين مختلفتين لـ ℓ ، لكن ليس من أجل قيمتين مختلفتين لـ m_ℓ .

ان اكثر الطرائق مباشرة في ايجاد التوابع الخاصة المشتركة لموثري العزم الحركي $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ هي حل المعادلة الخاصة $\hat{L}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}$ أي.

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y_{\ell m}}{\partial\phi^2} + \ell(\ell+1) Y_{\ell m} = 0 \qquad (4.14)$$

بالتعويض بعبارة ($Y_{\ell m}$) من (4.11) نجد

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{d\Theta_{\ell m}}{d\theta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta_{\ell m} + \ell(\ell+1)\Theta_{\ell m} = 0 \qquad (4.15)$$

هذه المعادلة مألوفة في نظريات التوافقيات الكروية ، وتقبل حلولا محدودة ووحيدة القيمة من اجل $\ell \geq |m|$ ، وهي بعد الاستنظام

$$(4.16)\quad \Theta_{\ell m} = (-1)^{\ell}\sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell+m)!}{2(\ell-m)!}}\ \frac{1}{2^{\ell}.\ell!}\ \frac{1}{\sin^{m}\theta}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{\ell-m}\sin^{2\ell}\theta$$

يعبر عن هذه الحلول غالبا بدلالة توابع ليجندر المرفقة

$$(4.17)\quad \Theta_{\ell m} = \begin{cases} (-1)^{m}\sqrt{\dfrac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{2(\ell+m)!}}\ P_{\ell}^{m}(\cos\theta) & m \geqslant 0 \\[2ex] \sqrt{\dfrac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{2(\ell+|m|)!}}\ P_{\ell}^{m}(\cos\theta) & m \leqslant 0 \end{cases}$$

تصبح كثيرات حدود ليجندر المرفقة من أجل $m = 0$ كثيرات حدود ليجندر $P_{\ell}(\cos\theta)$ وتعطى بالعلاقة

$$(4.18)\quad \Theta_{\ell 0} = \sqrt{(2\ell+1)/2}\ \ P_{\ell}(\cos\theta)$$

$$(4.19)\quad = \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}}\left\{\frac{1}{2^{\ell}.\ell!}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{\ell}(\cos^{2}\theta-1)^{\ell}\right\}$$

تدعى العلاقة الأخيرة والتي يمكن بها توليد كثيرات حدود ليجندر P_{ℓ} علاقة رودريك .

أما كثيرات حدود ليجندر المرفقة $P_{\ell}^{m}(\cos\theta)$ فيمكن توليدها بدءاً من كثيرات حدود ليجندر $P_{\ell}(\cos\theta)$ بالعلاقة

$$(4.20)\quad P_{\ell}^{m}(\cos\theta) = \sin^{m}\theta\ \frac{d^{m}P_{\ell}(\cos\theta)}{(d\cos\theta)^{m}} \qquad (m = 0, 1, 2, \ldots, \ell)$$

نكتب هنا بعض التوافقيات الكروية $Y_{\ell m} = \Phi_{m}\Theta_{\ell m}$ من أجل قيم صغيرة لـ ℓ و m

$$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta \, e^{2i\phi}$$

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, e^{i\phi} , \quad Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos\theta \sin\theta \, e^{i\phi}$$

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} , \; Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \qquad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, e^{-i\phi} \quad Y_{2,-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos\theta \sin\theta \, e^{-i\phi}$$

$$Y_{2,-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta \, e^{-2i\phi}$$

عند ما يكون جسيم في حالة معروف العزم الحركي المقابل لها ويتعين بالعدد الكمي المداري :

$$\ell = 0 , 1 , 2 , 3 , \ldots$$

فاننا نقول انها في الحالة s , p , d , f , ...

تعود هذه التسميات الى اوصاف الطيوف الضوئية لذرة الهيدروجين ، حيث تختصر الحروف اللاتينية الكلمات : (حاد sharp) ، (أساسي pricipl) ،(منتشر diffuse) ، (دقيق fine) ....

تمرين 1 . برهن بدءا من العلاقة

$$L_+ Y_{\ell\ell} = L_+ e^{i\ell\phi} \, \Theta_{\ell\ell} = 0 \tag{4.21}$$

على ان الشكل المستنظم ل $\Theta_{\ell\ell}$ هو

$$\Theta_{\ell\ell} = (-1)^\ell \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{2}} \; \frac{1}{2^\ell . \ell!} \sin^\ell\theta \tag{4.22}$$

ما الشكل المستنظم ل $Y_{\ell\ell}$ ؟

برهان : تكتب العلاقة (4.21) بحسب (3.3)

$$\hbar e^{i\phi} (\partial/\partial\theta + i \cot\theta \, \partial/\partial\phi) \, \Theta_{\ell\ell}(\theta) \, e^{i\ell\phi} = 0$$

$$\Rightarrow \quad \hbar e^{i(\ell+1)\phi} \left(\frac{d\Theta_{\ell\ell}}{d\theta} - \ell \cot\theta \, \Theta_{\ell\ell} \right) = 0$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d\Theta_{\ell\ell}}{d\theta} - \ell \cot\theta \, \Theta_{\ell\ell} = 0$$

$$(4.23) \Rightarrow \quad \Theta_{\ell\ell}(\theta) = c \, (\sin\theta)^{\ell}$$

تُعيّن c بحيث يكون

$$\int_0^{\pi/2} |\Theta_{\ell\ell}|^2 \sin\theta \, d\theta = 1 \qquad (4.24)$$

من (4.23) و(4.24) نجد

$$|c|^{-2} = \int_0^{\pi} (\sin\theta)^{2\ell} \sin\theta \, d\theta$$

$$= 2 \int_0^{\pi/2} (\sin\theta)^{2\ell+1} \, d\theta$$

$$= 2 \, \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdot \ldots \ldots \cdot 2\ell}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \ldots (2\ell+1)}$$ (انظر الملحق A للفصل X)

$$= 2 \, \frac{(2^{\ell} \cdot \ell!)^2}{(2\ell+1)!} \qquad (4.25)$$

بناء على (4.23) و(4.24) نجد ان $\Theta_{\ell\ell}$ معطى بالعبارة (4.22) كما هـــو مطلوب .

من الواضح أن $Y_{\ell\ell}$ بعد الاستنظام وفق (4.10) يعطى بالعبارة

$$Y_{\ell\ell} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} e^{i\ell\phi} \, \Theta_{\ell\ell}(\theta)$$

تمرين 2 . باستخدام نتيجة التمرين السابق برهن على ان

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad , \quad Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \; e^{i\phi}$$

اوجد بتطبيق $\hat{L}_-$ على Y_{11} ثم استنظامه Y_{10} ، ثم اوجد الشكل المستنظم ل

$Y_{1,-1}$ ..

§ 5 . ماذا عن توابع ليجندر؟

§ (5.1) كثيرات حدود ليجندر

يعرف كثير حدود ليجندر من المرتبة ℓ ، ويرمز له ب P_ℓ ، بأنه الحل على شكل كثير الحدود من المرتبة ℓ لمعادلة ليجندر التفاضلية

$$(1-x^2)\frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + \ell(\ell+1)y = 0 \qquad (A.1)$$

حيث اختير عامل الحد ذي القوة الكبرى x^ℓ مساويا الى $(2\ell)!/2^\ell(\ell!)^2$.

بوضع $y = u^{(\ell)}$ في معادلة ليجندر نجد

$$(1-x^2)\,u^{(\ell+2)} - 2x\,u^{(\ell+1)} + \ell(\ell+1)\,u^{(\ell)} = 0 \qquad (A.2)$$

وبالاعتماد على قاعدة ليبنتز نلاحظ ان

$$\{(1-x^2)u'\}^{(\ell+1)} = (1-x^2)\,u^{(\ell+2)} - 2x(\ell+1)\,u^{(\ell+1)} - \ell(\ell+1)\,u^{(\ell)}$$

وبناء على النتيجة الاخيرة نكتب (A.2) بالشكل

$$\{(1-x^2)u'\}^{(\ell+1)} + 2x\ell\,u^{(\ell+1)} + 2\ell(\ell+1)\,u^{(\ell)} = 0$$

وباستعمال ليبنتز مرة ثانية نجد

$$\{(1-x^2)u' + 2x\ell u\}^{\ell+1} = 0$$

وأحد حلول هذه المعادلة هو

$$(1-x^2)\,u' + 2x\ell u$$

ونجد منه بفصل المتحولات والمكاملة أن

$$u = (x^2-1)^\ell$$

وتقتضي هذا ان كثير الحد

$$P_\ell = \frac{1}{2^\ell.\,\ell!}\,\frac{d^\ell}{dx^\ell}(x^2-1)^\ell \tag{A.3}$$

هو حل لمعادلة ليجندر. ولقد تم اختيار العامل $(1/2^\ell.\,\ell!)$ حيث يكون $P_\ell(1)=1$ مهما تكن ℓ . ويصبح من ثم عامل الحد الاعلى قوة فيه وهو x^ℓ مساويا الى $(2\ell)!/2^\ell.\,(\ell!)^2$.

تسمى العلاقة (A.3) علاقة رودريغ وهي تعطينا كثيرات حدود ليجندر من جميع المراتب . من هذه العلاقة يمكن ان نحصل على علاقات تدرج متعددة. فباشتقاق (A.3) نجد

$$\begin{aligned}
\frac{dP_\ell}{dx} &= \frac{1}{2^\ell.\,\ell!}\,\frac{d^{\ell+1}}{dx^{\ell+1}}(x^2-1)^\ell \\
&= \frac{1}{2^\ell.\,\ell!}\,\frac{d^\ell}{dx^\ell}\left[2\ell x(x^2-1)^{\ell-1}\right] \\
&= \frac{1}{2^{(\ell-1)}(\ell-1)!}\left[x\,\frac{d^\ell}{dx^\ell}(x^2-1)^{\ell-1} + \ell\,\frac{d^{\ell-1}}{dx^{\ell-1}}(x^2-1)^{\ell-1}\right] \\
&= x\,\frac{dP_{\ell-1}}{dx} + \ell P_{\ell-1}
\end{aligned}$$

ولدينا ايضا

$$P_\ell = \frac{1}{2^\ell.\,\ell!}\,\frac{d^\ell}{dx^\ell}\left[(x^2-1)(x^2-1)^{\ell-1}\right]$$

$$= \frac{1}{2^\ell . \ell !} \frac{d^\ell}{dx^\ell} \left[x^2 (x^2-1)^{\ell-1} \right] - \frac{1}{2^\ell . \ell !} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2-1)^{\ell-1}$$

$$= \frac{1}{2\ell \cdot 2^\ell \ \ell !} \frac{d^\ell}{dx^\ell} \left[x \frac{d}{dx} (x^2-1)^\ell - \frac{1}{2\ell} \frac{dP_{\ell-1}}{dx} \right.$$

$$= \frac{1}{2\ell \cdot 2^\ell \cdot \ell !} \left[x \frac{d^{\ell+1}}{dx^{\ell+1}} (x^2-1)^\ell + \ell \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2-1)^\ell \right] - \frac{1}{2\ell} \frac{dP_{\ell-1}}{dx}$$

$$= \frac{x}{2\ell} \frac{dP_\ell}{dx} + \frac{1}{2} P_\ell - \frac{1}{2\ell} \frac{dP_{\ell-1}}{dx}$$

التي نكتبها بالشكل

$$\frac{dP_{\ell-1}}{dx} = x \frac{dP_\ell}{dx} - \ell P_\ell \qquad (A.5)$$

من علاقتي التدرج

$$P'_\ell = x P'_{\ell-1} + \ell P_{\ell-1} \qquad (A.4)$$

$$P'_{\ell-1} = x P'_\ell - \ell P_\ell \qquad (A.5)$$

نجد بعد حذف $P'_{\ell-1}$ بينهما ان

$$(x^2-1) P'_\ell = \ell x P_\ell - \ell P_{\ell-1} \qquad (A.6)$$

وبحذف P'_ℓ بينهما نجد

$$(x^2-1) P'_{\ell-1} = -\ell x P_{\ell-1} + \ell P_\ell \qquad (A.7)$$

باستبدال ($\ell+1$) بـ ℓ في (A.5) ثم طرحها من (A.4) نجد

$$0 = x\,(P'_{\ell-1} - P'_{\ell+1}) + \ell P_{\ell-1} + (\ell+1) P_{\ell+1} \qquad (A.8)$$

باستبدال ($\ell+1$) بـ ℓ في (A.4) ثم طرحها من (A.5) نجد

$$P'_{\ell+1} - P'_{\ell-1} = (2\ell+1) P_\ell \qquad (A.9)$$

وهكذا نكتب (A.8) استنادا الى (A.9) بالشكل

$$(\ell+1) P_{\ell+1} - (2\ell+1)\, x P_\ell + \ell P_{\ell-1} = 0 \qquad (A.10)$$

§ (A.2) توابع ليجندر المرفقة

تسمى المعادلة التفاضلية

$$(1-x^2)\, y'' - 2x y' + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right] y = 0 \qquad (m \in \mathbb{N}) \qquad (A.11)$$

معادلة ليجندر المرفقة . وتسمى حلولها توابع ليجندر المرفقة .

اذا كان P_ℓ حلا لمعادلة ليجندر (A.1) فنجد باشتقاق معادلة ليجندر m مرة مستفيدين من قاعدة ليبنز

$$(1-x^2) P_\ell^{(m+2)} - 2 m x P_\ell^{(m+1)} - m(m-1) P_\ell^{(m)}$$
$$- 2x P_\ell^{(m+1)} - 2m P_\ell^{(m)} + \ell(\ell+1) P_\ell^{(m)} = 0$$

وبالاصلاح نصل الى المعادلة (نهمل الدليل ℓ موقتا)

$$(1-x^2) P^{(m+2)} - 2(m+1) x P^{(m+1)} + [\ell(\ell+1) - m(m+1)]\, P^{(m)} = 0 \qquad (A.12)$$

بوضع

$$P^{(m)} = (1-x^2)^r y$$

والتعويض في (A.12) والاصلاح نجد

$$(1-x^2)^2 y'' - [2(m+1)x(1-x^2) + 4rx(1-x^2)]\, y'$$
$$+\left\{4(m+1)rx^2 + (4r^2-2r)x^2 - 2r + [\ell(\ell+1)-m(m+1)](1-x^2)\right\} y = 0$$

وبعد التقسيم على $(1-x^2)$ نريد ان تكون المعادلة الناتجة هي معادلة ليجندر المرفقة . ويتحقق هذا باختيار $r = -\frac{m}{2}$.

وبناء على هذا واذا كان P_ℓ حلا لمعادلة ليجندر يكون

$$y = (1-x^2)^{m/2}\, P_\ell^{(m)}$$

حلا لمعادلة ليجندر المرفقة (A.11) .

تعرف توابع ليجندر المرفقة من المرتبة m ويرمز لها ب $P_\ell^{(m)}(x)$ بالعلاقة

$$P_\ell^m(x) = (1-x^2)^{m/2}\, \frac{d^m P_\ell}{dx^m} \tag{A.13}$$

حيث m عدد موجب صحيح . اذا كان $m > \ell$ يكون P_ℓ^m معدوما . من اجل m صحيح سالب نأخذ $P_\ell^m = P_\ell^{-m}$.

باشتقاق المعادلة (A.9) m مرة نجد

$$\frac{d^{m+1} P_\ell}{dx^{m+1}} = x\, \frac{d^{m+1} P_{\ell-1}}{dx^{m+1}} + (m+\ell)\, \frac{d^m P_{\ell-1}}{dx^m}$$

وبضرب طرفي هذه المعادلة بالمقدار $(1-x^2)^{\frac{1}{2}(m+1)}$ نجد انها تكتب بالشكل

$$P_\ell^{m+\ell} = x\, P_{\ell-1}^{m+\ell} + (m-\ell)(1-x^2)^{1/2}\, P_{\ell-1}^m \tag{A.14}$$

باشتقاق المعادلة (A.9) m مرة وبضرب الطرفين ب $(1-x^2)^{\frac{1}{2}(m+1)}$ نجد العلاقة

$$(A.15) \qquad P_{\ell+1}^{m+1} - P_{\ell-1}^{m+1} = (2\ell+1)(1-x^2)^{1/2} P_\ell^m$$

باستبدال ($\ell+1$)ب ℓ في المعادلة (A.14) ثم حذف P_ℓ^m بينها وبين (A.15) نجد (بعد استبدال $(m+1)$ ب m) مايلي

$$(A.16) \qquad (\ell+m)P_{\ell-1}^m + (\ell-m+1)P_{\ell+1}^m = (2\ell+1)xP_\ell^m$$

باشتقاق (A.7) m مرة وضرب المعادلة الناتجة بالمقدار $(1-x^2)^{m/2}$ نجد ان النتيجة يمكن ان تكتب بالشكل

$$(A.17) \qquad (1-x^2)^{1/2}[P_{\ell-1}^{m+\ell} - m(\ell+m-1)P_{\ell-1}^{m-1}] = (2m+\ell)xP_{\ell-1}^m - \ell P_\ell^m$$

باستبدال $m-1$ ب m في (A.14) ثم تعويض $P_{\ell-1}^{m-1}$ من هذه المعادلة في (A.17) نجد ان هذه الاخيرة تختزل الى الشكل

$$(A.18) \qquad (1-x^2)^{1/2} P_{\ell-1}^{m+1} = (m+\ell)xP_{\ell-1}^m - (\ell-m)P_\ell^m$$

الان لدينا

$$(1-x^2)\frac{dP_{\ell-1}^m}{dx} = (1-x^2)\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)^{\frac{1}{2}m}\frac{d^m P_{\ell-1}}{dx^m}\right]$$

$$= (1-x^2)^{\frac{1}{2}m+1}\frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}}P_{\ell-1} - mx(1-x^2)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_{\ell-1}$$

$$(A.19) \qquad = (1-x^2)^{1/2} P_{\ell-1}^{m+1} - mxP_{\ell-1}^m$$

بالتعويض في المعادلة (A.18) بقيمة $(1-x^2)^{1/2}P_{\ell-1}^{m+1}$ محسوبة من المعادلة (A.19) نجد ان

$$(A.20) \qquad (1-x^2)\frac{dP_{\ell-1}^m}{dx} = \ell x P_{\ell-1}^m - (\ell-m)P_\ell^m$$

بتبديل ($\ell+1$) بـ ℓ في المطابقة (A.18)، وبعدها حذف $P_{\ell+1}^m$ بينها وبين المعادلة (A.16) نجد مطابقة جديدة

$$(A.21) \qquad (1-x^2)^{1/2} P_\ell^{m+1} = (\ell+m)P_{\ell-1}^m - (\ell-m)xP_\ell^m$$

بحذف $P_{\ell-1}^m$ بين هذه المتطابقة والمتطابقة (A.18) نجد

$$(A.22) \qquad x P_\ell^{m+1} = P_{\ell-1}^{m+1} + (\ell-m)(1-x^2)^{1/2} P_\ell^m$$

لنعتبر الان التكامل

$$\int_{-1}^{+1} P_\ell^m P_{\ell'}^m \, dx = \int_{-1}^{+1} (1-x^2)^m \frac{d^m P_\ell}{dx^m} \frac{d^m P_{\ell'}}{dx^m} dx$$

$$(A.23) \qquad = \frac{1}{2^{\ell+\ell'} \ell! \ell'!} \int_{-1}^{+1} (1-x^2)^m \frac{d^{m+\ell}}{dx^{m+\ell}} (x^2-1)^\ell \frac{d^{m+\ell'}}{dx^{m+\ell'}} (x^2-1)^{\ell'} dx$$

لنضع

$$u = (1-x^2)^m \frac{d^{m+\ell'}}{dx^{m+\ell'}} (x^2-1)^{\ell'}$$

$$dv = \frac{d^{m+\ell}}{dx^{m+\ell}} (x^2-1)^\ell \, dx$$

ولنكامل بالتجزئة ، فيكون الحد الواقع خارج التكامل

$$(1-x^2)^m \frac{d^{m+\ell'}}{dx^{m+\ell'}} (x^2-1)^{\ell'} \frac{d^{m+\ell-1}}{dx^{m+\ell-1}} (x^2-1)^\ell \Big|_{-1}^{+1}$$

وهو معدوم لأن العامل الاول فيه معدوم . وتكون من ثم نتيجة التكامل

$$\frac{-1}{2^{\ell+\ell'}\ell!\ell'!}\int_{-1}^{+1}\left(\frac{d^{m+\ell-1}}{dx^{m+\ell-1}}(x^2-1)^{\ell}\right)\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)^m\frac{d^{m+\ell'}}{dx^{m+\ell'}}(x^2-1)^{\ell'}\right]dx$$

وبالمكاملة بالتجزئة ايضا نرى ان الحد الواقع خارج التكامل معدوم ، حيث نعتبر الحد الاول تحت التكامل هو الحد الواجب ارجاعه اى u . وباجراء المكاملة بالتجزئة ماحصيلته ($m+\ell$) مرة يتحول الشكل ($A.23$) الى

$$\frac{(-1)^{m+\ell}}{2^{\ell+\ell'}\ell!\ell'!}\int_{-1}^{+1}(x^2-1)^{\ell}\frac{d^{m+\ell}}{dx^{m+\ell}}\left[(1-x^2)^m\frac{d^{m+\ell'}}{dx^{m+\ell'}}(x^2-1)^{\ell'}\right]dx \tag{A.24}$$

وذلك لأن الحد الواقع خارج التكامل يكون معدوما في كل مرة . ففي المراحل الـ ($m-1$) الاولى يكون v معدوما عند $x=\pm 1$ وفي المراحل الـ ($\ell+1$) اللاحقة يكون u معدوما عند $x=\pm 1$. ومن الواضح انه اذا كان Q كثير حدود فان

$$\frac{d^n}{dx^n}\left[(1-x^2)^p Q(x)\right]=0$$

محسوبا عند $+1$ أو -1 يكون معدوما بفرض ان $n<p$.

وبتركيز انتباهنا الان على الحد ذى القوة الكبرى في x نجد ان

$$\frac{d^{m+\ell}}{dx^{m+\ell}}\left[(1-x^2)^m\frac{d^{m+\ell'}}{dx^{m+\ell'}}(x^2-1)^{\ell'}\right]=0 \qquad \text{if } \ell>\ell'$$

$$=(-1)^m\frac{(2\ell)!(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \qquad \text{if } \ell=\ell'$$

وأما الحدود الاولى مرتبة في x فهي معدومة . تدلنا العلاقة السابقة على ان

$$\int_{-1}^{+1}P_\ell^m P_{\ell'}^m\,dx=\frac{(2\ell)!(\ell+m)!}{2^{2\ell}(\ell!)^2(\ell-m)!}\int_{-1}^{+1}(1-x^2)^{\ell}dx \qquad \text{if } \ell=\ell'$$

$$=0 \qquad \text{if } \ell\neq\ell'$$

ولكن

$$\int_{-1}^{+1}(1-x^2)^{\ell}dx = 2\int_{0}^{\pi/2}\cos^{2\ell+1}\theta\, d\theta = \frac{2^{2\ell+1}(\ell!)^2}{(2\ell+1)!}$$

وبناء عليه فان

$$\int_{-1}^{+1} P_\ell^m P_{\ell'}^m \, dx = \frac{2}{2\ell+1}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\,\delta_{\ell\ell'} \qquad (A.25)$$

وفي حالة خاصة ومن اجل $m=0$ نجد

$$\int_{-1}^{+1} P_\ell P_{\ell'} \, dx = \frac{2}{2\ell+1}\,\delta_{\ell\ell'} \qquad (A.26)$$

نشتق هنا نتيجة تكاملية مهمة اخرى . باستعمال المتطابقة (A.16) نجد ان

$$(A.27)\begin{cases}\displaystyle\int_{-1}^{+1} x\, P_{\ell'}^m \cdot P_\ell^m \, dx = \frac{1}{2\ell+1}\int_{-1}^{+1}\left\{(\ell+m)P_{\ell-1}^m + (\ell-m+1)P_{\ell+1}^m\right\} P_{\ell'}^m \, dx \\[2ex] \displaystyle = \frac{2(\ell+m)!}{(4\ell^2-1)(\ell-m-1)!} \quad \text{if } \ell=\ell'+1 \\[2ex] \displaystyle = \frac{2(\ell'+m)!}{(4\ell'^2-1)(\ell'-m-1)!} \\[2ex] = 0 \quad \text{فيما عدا ذلك}\end{cases}$$

§ (A.3) حل المعادلة الخاصة $L^2 Y_{\ell m} = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell m}$

بتغيير المتحول في (4.15) بالعلاقة

$$x = \cos\theta.$$

وملاحظة ان

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{dx}{d\theta}\frac{d}{dx} = -\sin\theta\,\frac{d}{dx}$$

نجد ان (4.15) تُكتب بعد الاصلاح على الشكل

$$(1-x^2)\frac{d^2\Theta_{\ell m}}{dx^2} - 2x\frac{d\Theta_{\ell m}}{dx} + \left\{\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right\}\Theta_{\ell m} = 0$$

وهي معادلة ليجندر المرفقة ، وحلولها بحسب (A.13)

$$P_\ell^m(\cos\theta) = \sin^m\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^m P_\ell(\cos\theta) \qquad m \geqslant 0$$

$$= \sin^{|m|}\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{|m|} P_\ell(\cos\theta) \qquad m \leqslant 0$$

اما الشكل المستنظم لهذه الحلول ، فهو بحسب (A.25)

$$\Theta_{\ell m} = \begin{cases} (-1)^m\left\{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{2(\ell+m)!}\right\}^{1/2}\sin^m\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^m P_\ell(\cos\theta) \\ \left\{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{2(\ell+|m|)!}\right\}^{1/2}\sin^{|m|}\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{|m|} P_\ell(\cos\theta) \end{cases}$$

وهو ما ينطبق مع (4.17)

§ 5 . التمثيل المصفوفي - $\{L^2, L_z\}$

تؤلف التوابع الخاصة $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ مجموعة كاملة متنامدة

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{\ell m}\, Y_{\ell' m'}\sin\theta\, d\theta\, d\phi = \delta_{\ell\ell'}\,\delta_{mm'} \qquad (5.1)$$

في فراغ التوابع الموجية $\Psi(\theta,\phi)$ المتعلقة بالعزم الحركي* . وهكذا يمكن نشر كل تابع موجي من الشكل $\Psi(\theta,\phi)$ بدلالة التوافقيات الكروية $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$:

$$\Psi = \sum_{\ell,m} a_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta,\phi) \tag{5.2}$$

حيث تعطى الامثال $a_{\ell m}$ بالعلاقة

$$a_{\ell m} = \langle Y_{\ell m} | \Psi \rangle = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y^*_{\ell m}\, \Psi \sin\theta \, d\theta \, d\phi \tag{5.3}$$

وبما ان المجموعة الكاملة المستعملة في التمثيل هي التوابع الخاصة $Y_{\ell m}$ ، لذلك نرى أن $Y_{\ell m}$ يُمثَّل بعمود جميع عناصره معدومة خلا عنصرا واحدا منها . ومثلا تمثل Y_{11} و Y_{10} و $Y_{1,-1}$ بالاعمدة

$$Y_{11} = [\,0 \,\vdots\, 1 \;\; 0 \;\; 0 \,\vdots\, 0 \;\; 0 \;\; 0 \;\; 0 \;\; 0 \,\vdots\, \cdots\,]^{\sim}$$

$$Y_{10} = [\,0 \,\vdots\, 0 \;\; 1 \;\; 0 \,\vdots\, 0 \;\; 0 \;\; 0 \;\; 0 \;\; 0 \,\vdots\, \cdots\,]^{\sim}$$

$$Y_{1,-1} = [\,0 \,\vdots\, 0 \;\; 0 \;\; 1 \,\vdots\, 0 \;\; 0 \;\; 0 \;\; 0 \;\; 0 \,\vdots\, \cdots\,]^{\sim}$$

حيث $\sim$ ترمز للمنقول . ويمثل كل تابع موجي بعمودلا منته من الادنى وتتحدد

---

* يمكن اخذ فراغ التوابع الموجية في هذه الحالة مجموعة التوابع $\Psi(\theta,\phi)$ المحققة للشرط :

$$\|\Psi\|^2 = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |\Psi|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi < \infty$$

بعبارة ثانية نقول ان فراغ التوابع الموجية هو $\mathcal{L}^2(S^2)$ حيث S^2 كرة الواحدة، وحيث تولد المسافة

$$ds^2 = \sin^2\theta \, d\phi^2 + d\theta^2$$

المعرفة على هذه الكرة جداء داخليا على مجموعة التوابع المركبة المعرفة عليها

$$\langle \Psi | \varphi \rangle = \int_{S^2} \Psi^* \varphi \, d\tau$$

يعطى فيه العنصر الحجمي من الفراغ بالعلاقة

$$d\tau = \sin\theta \, d\theta \, d\phi$$

مركباته بالعلاقة (5.3)،كما تمثل الملحوظات الفيزيائية بمصفوفات غير منتهية . من الواضح ان المصفوفتين الممثلتين لـ $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ هما مصفوفتان قطريتان عناصر القطر الرئيسي لكل منهما هي مجموعة القيم الخاصة للمؤثر المقابل . واذا شئنا بقصد التدريب على حساب عناصرهما ، وجدنا بشأن $[\hat{L}_z]$ أن :

$$[\hat{L}_z] = \hbar \left[\begin{array}{c|c|c|c} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \begin{matrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{matrix} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \begin{matrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{matrix} \end{array}\right.$$

أما عناصر المصفوفة $[\hat{L}^2]$ فهي

$$\begin{aligned} \hat{L}^2_{lm,l'm'} &= \langle Y_{lm} | \hat{L}^2 Y_{l'm'} \rangle \\ &= l'(l'+1)\hbar^2 \langle Y_{lm} | Y_{l'm'} \rangle \\ &= l'(l'+1)\hbar^2 \delta_{ll'} \delta_{mm'} \end{aligned}$$

ولذلك نكتب $[\hat{L}^2]$ بالصورة التالية :

$$[\hat{L}^2] = \hbar^2 \left[\begin{array}{c|c|c|c} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \begin{matrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{matrix} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \begin{matrix} 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 \end{matrix} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \begin{matrix} 12 & 0 \\ 0 & 12 \end{matrix} \end{array}\right.$$

لاحظ ان جميع عناصر المصفوفتين السابقتين معدومة عدا عناصرهما القطريةوالتي هي القيم الخاصة للمؤثر المقابل .

ولمعرفة المصفوفتين الممثلتين لمؤثرى البناء والهدم نسلك الطريقة التالية : بتطبيق $\hat{L}_-$ على $Y_{\ell\ell}$ نحصل على تابع يتناسب مع $Y_{\ell,\ell-1}$:

$$c_{\ell,\ell-1}\,\hat{L}_- Y_{\ell\ell} = Y_{\ell,\ell-1}$$

حيث ان $c_{\ell,\ell-1}$ ثابت يُختار بحيث يكون $Y_{\ell,\ell-1}$ مستنظما . للحصول على $Y_{\ell m}$ (حيث m معطى) يجب تطبيق $\hat{L}_-$ على $Y_{\ell\ell}$ عددا من المرات يساوى $(\ell-m)$ اى :

$$Y_{\ell m} = c_{\ell m}\, L_-^{\ell-m}\, Y_{\ell\ell}$$

لا ستنتاج علاقة بين الثوابت c التي تجعل التوابع $Y_{\ell m}$ مستنظمة ، نلاحظ ان

$$Y_{\ell m} = c_{\ell m}\,\hat{L}_-\,(\hat{L}_-^{\ell-m-1}\,Y_{\ell\ell})$$

$$= c_{\ell m}\,\hat{L}_-\,(Y_{\ell,m+1}/c_{\ell,m+1})$$

$$= (c_{\ell m}/c_{\ell,m+1})\,\hat{L}_-\,Y_{\ell,m+1}$$

بالافادة من شرط استنظام $Y_{\ell m}$ ومن ان $\hat{L}_+$ هو المرافق الهرميتي لـ $\hat{L}_-$ ، نجد بعد وضع $k = c_{\ell m}/c_{\ell,m+1}$

$$1 = \langle Y_{\ell m} | Y_{\ell m} \rangle$$

$$= |k|^2 \langle L_- Y_{\ell,m+1} | \hat{L}_- Y_{\ell,m+1} \rangle$$

$$= |k|^2 \langle Y_{\ell,m+1} | L_+ L_- Y_{\ell,m+1} \rangle$$

$$= |k|^2 \langle Y_{\ell,m+1} | [L^2 - L_z^2 + \hbar L_z]\, Y_{\ell,m+1} \rangle \quad \text{(بحسب (2.5))}$$

$$= |k|^2 \{\ell(\ell+1) - m^2 - m\}\,\hbar^2 \langle Y_{\ell,m+1} | Y_{\ell,m+1} \rangle$$

$$= |k|^2 (\ell-m)(\ell+m+1)\,\hbar^2$$

ومنه

$$\hat{L}_- Y_{\ell, m+1} = \sqrt{(\ell - m)(\ell + m - 1)}\ \hbar\, Y_{\ell m}$$

من هذه العلاقة يمكن ان نحسب عناصر المصفوفة $[\hat{L}_-]$

$$(L_-)_{\ell m, \ell' m'} = \langle Y_{\ell m} | \hat{L}_- Y_{\ell' m'} \rangle$$

$$= \sqrt{(\ell' + m')(\ell' - m' + 1)}\ \hbar\, \delta_{\ell \ell'}\, \delta_{m, m'-1}$$

ولذلك نجد

$$[\hat{L}_-] = \hbar \left[\begin{array}{c|c|c|c}
0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline
0 & \begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{array} & 0 & 0 \\ \hline
0 & 0 & \begin{array}{ccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{array} & 0 \\ \hline
0 & 0 & 0 &
\end{array} \right.$$

اما عناصر مصفوفة $\hat{L}_+$ - المرافق الهرميتي لـ $\hat{L}_-$ - فهي

$$(\hat{L}_+)_{\ell m, \ell' m'} = \langle Y_{\ell m} | \hat{L}_+ Y_{\ell' m'} \rangle = \langle \hat{L}_- Y_{\ell m} | Y_{\ell' m'} \rangle$$

$$= \langle Y_{\ell' m'} | \hat{L}_- Y_{\ell m} \rangle^* = (\hat{L}_-)^*_{\ell' m', \ell m}$$

ونحصل على المصفوفة $[\hat{L}_+]$ بتبديل الاسطر اعمدة والاعمدة اسطرا في المصفوفة $[\hat{L}_-]$ (ثم أخذ المرافقات العقدية) . نحصل على مصفوفتي $\hat{L}_x$ و $\hat{L}_y$ بالاستفادة من العلاقتين

$$\hat{L}_x = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-) \quad , \quad \hat{L}_y = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-)$$

ولذلك نجد

$$[\hat{L}_x] = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left[\begin{array}{c|ccc|c} 0 & & 0 & & 0 \\ \hline & 0 & 1 & 0 & \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 1 & 0 & \\ \hline 0 & & 0 & & \end{array} \right]$$

و

$$[\hat{L}_y] = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left[\begin{array}{c|ccc|c} 0 & & 0 & & 0 \\ \hline & 0 & -i & 0 & \\ 0 & i & 0 & -i & 0 \\ & 0 & i & 0 & \\ \hline 0 & & 0 & & \end{array} \right]$$

جمع العزوم الحركية

لنفترض لدينا جملة مؤلفة من جزأين تفاعلهما ضعيف مع بعضهما . اذا كان التفاعل بين الجزأين معدوما فان قانون حفظ العزم الحركي ينطبق على كل من الجزأين . نعرّف العزم الحركي الكلي $\hat{\underline{J}}$ للجملة بأكملها على أنه مجموع العزمين الحركيين $\hat{\underline{L}}_1$ و $\hat{\underline{L}}_2$ لجزأيها . في الحالة التي يكون فيها التفاعل بين جزأى الجملة ضعيفا فان $\hat{\underline{L}}_1$ و $\hat{\underline{L}}_2$ ليسا محفوظين تماما ،لكن تبقى الاعداد الكوانتية ℓ_1 و ℓ_2 والتي

تحدد $\hat{L}_1^2$ و $\hat{L}_2^2$ تبقى اعدادا كوانتية صالحة لوصف تقريبي لحالة الجملة.

من أجل الجمل السابقة تبرز مسألة ايجاد " قانون جمع " العزوم الحركية. لكن

$$\hat{J} = \hat{L}_1 + \hat{L}_2 \tag{6.1}$$

يكون

$$\hat{J}_x = \hat{L}_{1x} + \hat{L}_{2x} , \hat{J}_y = \hat{L}_{1y} + \hat{L}_{2y} , \hat{J}_z = \hat{L}_{1z} + \hat{L}_{2z} . \tag{6.2}$$

حيث ان $\hat{L}_1$ يُمثل بمتحولات (تتعلق باحداثيات القسم الأول) تختلف عن المتحولات التي يمثل بها $\hat{L}_2$ (تتعلق باحداثيات القسم الثاني)، فان مركبات $\hat{L}_1$ تتآلف مع مركبات $\hat{L}_2$. نعرف مربع العزم الحركي الكلي كالمألوف بالعلاقة

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$$

من الواضح ان $\hat{J}^2$ يتآلف مع احدى مركباته ولتكن $\hat{J}_z$ ، كما يتآلف مع $\hat{L}_1^2$ و $\hat{L}_2^2$ (برهن على ذلك). لنرمز بـ j للعدد الكمي المداري الكلي وبـ m_j للعدد الكمي المغناطيسي الكلي) وذلك من اجل قيمتين اعطيتا لـ ℓ_1 و ℓ_2 لتحددا قيمتي $\hat{L}_1^2$ و $\hat{L}_2^2$ على الترتيب ؟ ينتج وضوحا من العلاقة

$$\hat{J}_z = \hat{L}_{1z} + \hat{L}_{2z} \tag{6.3}$$

أن

$$m_j = m_1 + m_2 \tag{6.4}$$

حيث ان m_1 و m_2 هما العددان الكميان المغناطيسيان المتعلقان بالعزمين الحركيين للجزأين الأول والثاني على الترتيب . لكن علاقة جمع مربعي العزمين الحركيين ليست ببساطة العلاقة (6.4) والتي تحدد m_j . لاستخراج هذه العلاقة نسير في المحاكمة التالية :

اذا اخذنا $\{\hat{L}_1^2 , \hat{L}_2^2 , \hat{L}_{1z} , \hat{L}_{2z}\}$ كمجموعة تامة من الملحوظات الفيزيائية المتآلفة فان كل حالة تتعين بقيم الاعداد $(\ell_1 , \ell_2 , m_1 , m_2)$. من اجل قيمتين معطاتين لـ ℓ_1 و ℓ_2 تأخذ الثنائية (m_1 , m_2) قيما عددها $(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)$

وعليه فان هنالك $(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)$ حالة توافق القيمتين ℓ_1 و ℓ_2 نفسيهما . نرمز الى التابع حالة الجملة في هذا التمثيل بالرمز $\phi_{\ell_1 \ell_2 m_1 m_2}$.

عوضا عن المجموعة التامة السابقة يمكن أن نأخذ $\{\hat{L}_1^2, \hat{L}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z\}$ كمجموعة تامة اخرى . تتحدد عندها حالة الجملة بالأعداد الكوانتية (ℓ_1, ℓ_2, j, m_j) . نرمز الى تابع الحالة الموافق بـ $\psi_{\ell_1 \ell_2 j m_j}$. من اجل ℓ_1 و ℓ_2 معطيين توجد وكما سبق ، $(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)$ حالة موافقة . بعبارة ثانية تأخذ الثنائية (j, m_j) من أجل ℓ_1 و ℓ_2 معطيين $(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)$ قيمة . يمكن تعيين هذه القيم كما يلي :

من اجل كل قيمة لـ j توجد $2j+1$ قيمة ممكنة لـ m_j وهي كافة القيم الصحيحة من $-j$ الى $+j$ ، وتكون القيمة العظمى لـ m_j في الحالة ϕ

$$(m_j)_{max} = (m_1)_{max} + (m_2)_{max} = \ell_1 + \ell_2 \qquad (6.5)$$

اذن فالقيمة العظمى لـ m_j في الحالة ψ هي أيضا $\ell_1+\ell_2$ ، ومن ثم فالقيمة العظمى لـ j هي $\ell_1+\ell_2$. لننتقل الى القيمة الأدنى لـ m_j وهي $m_j = \ell_1+\ell_2-1$. توجد حالتان ϕ توافقان هذه القيمة لـ m_j وهما $(m_1 = \ell_1 \ , \ m_2 = \ell_2 - 1)$ و $(m_1 = \ell_1 - 1, m_2 = \ell_2)$. اذن فيجب ان توجد حالتان ψ توافقان هذه القيمة لـ m_j . تتعين الاولى بالثنائية $(j = \ell_2+\ell_1 , m_j = j-1)$ والثانية بـ $(j = \ell_1+\ell_2-1, m_j = j)$.
من اجل القيمة $m_j = \ell_1 + \ell_2 - 2$ توجد ثلاث حالات ϕ توافق القيم التالية للثنائية (m_1, m_2) : (ℓ_1, ℓ_2-2) و (ℓ_1-1, ℓ_2-1) و (ℓ_1-2, ℓ_2) ، يقود هذا الى وجود ثلاث قيم للثنائية (j, m_j) وهي : $(\ell_1+\ell_2 , \ell_1+\ell_2-2)$ و $(\ell_1+\ell_1-1 , \ell_1+\ell_2-2)$ و $(\ell_1+\ell_2-2, \ell_1+\ell_2-2)$. أي يمكن ان تأخذ j ثلاث قيم .

يمكن اعادة المناقشة السابقة مرة تلو اخرى وذلك حيثما كان انقاص m_j واحدا صحيحا يزيد عدد الحالات حالة واحدة . يمكن ملاحظة ان هذا يحدث حتى تصل m_j الى قيمة قدرها $|\ell_1-\ell_2|$. عندما تنقص m_j عن هذه القيمة لا يزداد عدد الحالات (الموافقة لقيم مختلفة لـ j) بل يبقى عددها $(2\ell_2+1)$ ، على فرض

أن $\ell_2 \leq \ell_1$. وعليه فان $|\ell_1 - \ell_2|$ هي أصفر قيمة ممكنة لـ j . النتيجة التي وصلنا اليها هي أنه من اجل ℓ_1 و ℓ_2 معطيين يمكن ان تأخذ j القيم :

$$j = \ell_1 + \ell_2 \, , \; \ell_1 + \ell_2 - 1 \, , \; \ldots \; , \; |\ell_1 - \ell_2| \qquad (6.6)$$

أى مامجموعه $2\ell_2+1$ قيمة مختلفة ($\ell_2 \leq \ell_1$) . يمكن التحقق من انه نحصل بالفعل على ($2\ell_2+1$) ($2\ell_1+1$) قيمة مختلفة للثنائية (j , m_j) . من المهم ان نلاحظ أنه اذا اهملنا الـ ($2j+1$) قيمة ممكنة لـ m وذلك من اجل j معطى فان حالة واحدة تقابل كل قيمة ممكنة (6.6) لـ j .

تمرين : أعد المحاكمة السابقة من اجل $\ell_1 = 2$ و $\ell_2 = 1$.

يمكن تعميم قاعدة جمع عزمين حركيين التي حصلنا عليها ، من أجل جمع أى عدد من العزوم الحركية وذلك بتطبيق هذه القاعدة مرة تلو أخرى .

الفصل التاسع

الحركة في حقل مركزي

§ ١. معادلة شرودنجر في الاحداثيات القطبية :

ان معادلة شرودنجر لجسيم يتحرك في حقل محفوظ طاقته الكامنة $V(r,\theta,\phi)$ هي

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right]\psi(r,\phi,\theta)=E\,\psi(r,\phi,\theta) \qquad (1\cdot1)$$

حيث تعطى عبارة اللابلاسيان في الاحداثيات القطبية (انظر §8) بالعلاقة

$$\nabla^2=\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \qquad (1\cdot2)$$

وبمقارنة العبارة الي يحتويها القوسان المتوسطان مع عبارة L^2 المعطاة في البحث الماضي نجد أن موئثر هاميلتون يكتب بالشكل

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{2mr^2}L^2+V(r,\theta,\phi) \qquad (1\cdot3)$$

ويكون لدينا

$$[\hat{H},\hat{L}_z]=[V,-i\hbar\,\partial/\partial\phi]=i\hbar\,\partial V/\partial\phi \qquad (1\cdot4)$$

وتبين هذه العلاقة ان أحد الملحوظين $\hat{H}$ او $\hat{L}_z$ يمكن قياسه بدقة في لحظة ما. أما اذا كان V مستقلة عن ϕ، فانه يمكن قياس $\hat{H}$ و $\hat{L}_z$ معا بدقة ، واذا قيس $\hat{L}_z$ بدقة في لحظة ما فانه يبقى له هذه القيمة الدقيقة خلال الحركة . في هذه الحالة يكون $V(r,\theta)$ متناظرا بالنسبة للمحور Oz ويقال عن الحقل انه متناظر محوريا .

لنعتبر الآن مسألة تآلف $\hat{H}$ و $\hat{L}^2$. بالحقيقة

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = [V(r,\theta), \hat{L}^2] \qquad (1.5)$$

وبما ان $\hat{L}^2$ يتعلق ب θ و ϕ ، اذن يكون $\hat{V}$ متآلفا مع $\hat{L}^2$ ، فقط لما يكون V مستقلا عن θ ايضا ويتبع r فقط . ونصادف الحالة الاخيرة لما تكون القوة تتجه نحو او بعيداً عن نقطة ثابتة O نسميها مركز الحقل . يسمى الحقل في الحالة التي يكون فيها الطاقة الكامنة متعلقة فقط ببعد الجسيم r عن نقطة ثابتة O ، يسمى حقلا مركزيا كروي التناظر . في حقل كهذا يكون $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ محفوظان واذا كانت a و b و E قياسات $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ و $\hat{H}$ في لحظة ما فانها تبقى كذلك خلال الحركة والى أن يتم التأثير على الجسيم بقوة اضافية ما .

نلخص ما سبق بقولنا انه في الحالة التي تكون فيها V متناظرة كرويا ، تؤلف الملحوظات $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ مجموعة تامة من الملحوظات المتآلفة، لأن

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \,. \qquad (1.6)$$

لنرمز ب $\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)$ لمجموعة التوابع الخاصة المشتركة لمجموعة الملحوظات المتآلفة . ومن الواضح انه يمكن كتابة هذه التوابع الخاصة بالشكل

$$\psi_{n\ell m}(r,\phi,\theta) = R_{n\ell m}(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi) \qquad (1.7)$$

حيث $Y_{\ell m}$ هي التوابع الخاصة المشتركة ل $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$. تحقق التوابع $\psi_{n\ell m}$ معادلة شرود نجر $H\psi = E\psi$ ، أي أن

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V\right]\psi_{n\ell m} = E_{n\ell m}\psi_{n\ell m} \qquad (1.8)$$

بالاستفادة من كون $Y_{\ell m}$ تابعا خاصا ل $\hat{L}^2$ نجد بعد تعويض الشكل (1.7) ل $\psi_{n\ell m}$ في (1.8) ثم اختصار $Y_{\ell m}$ من الطرفين ان

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} + V\right]R_{n\ell} = E_{n\ell} R_{n\ell} \qquad (1.9)$$

ولقد اسقطنا الدليل m لأنّ المؤثر الموجود بين القوسين المتوسطين لا يتعلق به .

سوف نرى بعد ان نحل المعادلة السابقة ان $E_{n\ell}$ لا تتعلق ب ℓ ايضا ولذلك يمكن ان تكون رموزنا من الان لهاتين الكميتين هي $R_{n\ell}$ و E_n ، ولكنا سنسقط هذه الادلة كلها موقتا بغية التبسيط الشكلي . نكتب الآن (1.9) على الصورة

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E-V) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R = 0 \qquad (1.10)$$

تسمى هذه المعادلة او المعادلة (1.9) ، معادلة شرودنجر القطرية وذلك لانها تصف تغيرات الجزء القطرى $R(r)$ من التابع الموجي $\Psi = RY$ لجسيم يتحرك في حقل مركزى متناظر كرويا . اما حلول هذه المعادلة فتتوقف على صيغة $V(r)$.

§ 2 . الذرات شبه الهيدروجينية :

نعني بالذرات شبه الهيدروجينية ذرات الهيدروجين ونظائره وكل الشوارد التي تحتوى على الكترون وحيد كالهيليوم أحادى التشرد He^{+} والليثيوم ثنائي التشرد Li^{++} وهكذا . . . اذا كان Z الرقم الذرى للعنصرتكون شحنةنواته Ze وتكون الطاقة الكامنة للالكترون الوحيد في ذرته

$$V(r) = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r \qquad (2.1)$$

§ (2.1) سويات الطاقة وتوابع حالاتها الخاصة :

بتعويض الطاقة الكامنة $V(r)$ في (1.10) تصبح معادلة شرودنجر القطرية المتعلقة بالذرة شبه الهيدروجينية

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R = 0 \qquad (2.2)$$

لكي نكتشف السلوك المقارب لحلول هذه المعادلة نجعل r فيها يسعى الى اللانهاية ، فتصبح :

$$\frac{d^2R}{dr^2} - \beta^2 R = 0 \qquad (2.3)$$

حيث ان $\beta^2 = -2mE/\hbar^2$.

تقبل المعادلة (2.2) حلان خاصان $e^{\pm\beta r}$ من اجل r كبيرة بما فيه الكفاية . ولكن الحل $e^{\beta r}$ لا يمكن ان يمثل سلوكا مقاربا للحل $R(r)$ لأنه يسعى الى اللانهاية عندما تسعى r اليها . نستنتج اذن ان $R(r)$ يسلك سلوك $e^{-\beta r}$ عند اللانهاية ، ولذلك نضع

$$R(r) = \exp(-\beta r)\, F(r) \qquad (2.4)$$

حيث ان $F(r)$ متحول تابعي جديد . ومن المناسب ايضا تغيير المتحول المستقل من r الى x بوضع

$$x = 2\beta r = \sqrt{8m|E|}\; r/\hbar \qquad (2.5)$$

وبذلك تصبح المعادلة (2.2)

$$x\frac{d^2F}{dx^2} + (2-x)\frac{dF}{dx} - \left[1-\lambda+\frac{\ell(\ell+1)}{x}\right]F = 0 \qquad (2.6)$$

حيث وضعنا

$$\lambda = \sqrt{\frac{m}{-2E}}\;\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \qquad (2.7)$$

يمكن ارجاع المعادلة الأخيرة (2.6) الى شكل يعرف باسم معادلة لاغيور وذلك بوضع

$$F = x^{\ell}\, y \qquad (2.8)$$

وتكون المعادلة التفاضلية المتعلقة بالمتحول التابعي الجديد y

$$xy'' + (2\ell+2-x)y' + (\lambda-\ell-1)y = 0 \qquad (2.9)$$

نستخدم الآن طريقة فروبينوس في حل هذه المعادلة،فنفترض ان الحل على شكل سلسلة لانهائية .

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \qquad (2.10)$$

وبالتعويض من أجل y من (2.10) في (2.9) نجد

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n n(n-1) x^{n-1} + (2\ell+2)\sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^{n-1} - \sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^n + (\lambda-\ell-1)\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = 0$$

وبتغيير كل n الى $(n+1)$ في السلسلتين الأولى والثانية ، نجد

$$\sum_{n=0}^{\infty}\{a_{n+1}[(n+1)n+(n+1)(2\ell+2)] - a_n[n+\ell+1-\lambda]\} x^n = 0 \qquad (2.12)$$

وبما ان العلاقة السابقة يجب ان تتحقق مطابقة في x ، لذلك تساوي امثال قوى x المختلفة بالصفر ، ومنه نجد علاقة التدرج التالية :

$$a_{n+1}(n+1)(n+2\ell+2) = a_n(n+\ell+1-\lambda) \qquad (2.13)$$

وهي صحيحة من أجل $n = 0, 1, 2, \dots$. نكتب العلاقة السابقة بالشكل

$$a_{n+1} = \frac{(n+\ell+1-\lambda)}{(n+1)(n+2\ell+2)} a_n . \qquad (2.14)$$

ونستنتج منها بعد اخذ $a_0 = 1$ الحل التالي

$$y = 1 + \frac{\ell+1-\lambda}{1!(2\ell+2)} x + \frac{(\ell+1-\lambda)(\ell+2-\lambda)}{2!(2\ell+2)(2\ell+3)} x^2 + \dots \qquad (2.15)$$

اذا لم تكن λ عددا صحيحا موجبا تصبح كافة حدود سلسلة y موجبة كلها بعد حد معين يتوقف على قيمة ℓ وذلك لأن x موجب . وتكون النسبة بين عاملي حدين متتاليين في السلسلة

$$\frac{a_n}{a_{n+1}} = \frac{n+\ell-\lambda}{n(n+2\ell+1)} > \frac{3}{4n} \qquad (2.16)$$

من أجل n كبيرة بما يكفي، وبذلك يكون (انظر §C)

$$y \geqslant k \exp(\tfrac{3}{4}x) + P(x) \qquad (2.17)$$

واستنادا الى هذا نرى أنه من أجل x كبيرة

$$R(x) = e^{-\frac{1}{2}x} F(x) > k e^{\frac{1}{4}x} \qquad (2.18)$$

أى أن R يسعى الى اللانهاية اسرع من $e^{\frac{1}{4}x}$ لما تسعى x اليها ؛ ولذلك يكون هذا الحل مرفوضا على اساس فيزيائي . ويحدث الامر نفسه لو كانت λ عددا صحيحا موجبا أصغر من ($\ell+1$) . يبقى اذن الاحتمال الاخير وهو ان λ يساوى عددا صحيحا موجبا $n \geq (\ell+1)$ مما يؤدى الى انقطاع السلسلة عند رتبة $n=(\ell+1)$. ويكون y كثير حدود من المرتبة $(n-\ell-1)$ وهو كثير حدود لاغيور المعمم من الدرجة $(n-\ell-1)$ والمرتبة $(2\ell+1)$ (بعد غض النظر عن ثابت ضرب) ويكون الحل من أجل R على الشكل

$$R = R_{n\ell} = C_{n\ell}\, e^{-\frac{1}{2}x}\, x^{\ell}\, L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(x) \tag{2.19}$$

حيث $C_{n\ell}$ ثوابت . اما الحل الكامل في ψ فنحصل عليه من (1.7)

$$\psi_{n\ell m} = C_{n\ell}\, e^{-x/2}\, x^{\ell}\, L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(x)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi) \tag{2.20}$$

اذا كان $\lambda=n$، دلت المعادلة (2.7) على أن الطاقة E مكممة وتعطى سوية الطاقة E_n بالعلاقة

$$E_n = -\frac{m Z^2 e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2} \tag{2.21}$$

وهي سويات الطاقة نفسها التي تعطيها نظرية بور التي درست في مقرر الفيزياء الكمية في السنة الماضية . يمكن كتابة العلاقة الاخيرة بالشكل

$$E_n = -\frac{1}{2}\, m c^2 \alpha^2\, \frac{Z^2}{n^2} \tag{2.22}$$

حيث إن

$$\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c \tag{2.23}$$

هو ثابت البنية الدقيقة ويساوى $1/137$.

بحسب المعادلة (2.21) نجد أن β المعرفة على أنها $(-2mE/\hbar)^{1/2}$ هي

$$\beta = m Z e^2/4\pi\epsilon_0\hbar n \tag{2.24}$$

أما شرط الاستنظام فهو

$$\int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} \Psi^* \Psi \, r^2 \sin\theta \, d\phi = 1 \qquad (2.25)$$

اذا عوضنا Ψ من (2.20) وتذكرنا ان $Y_{\ell m}$ قد استنظم من قبل ، وجدنا ان هذا الشرط يؤول الى

$$\int_0^\infty (rR)^2 dr = 1 \qquad (2.26)$$

وبالتعويض من أجل R من (2.19) والاستفادة من النتيجة (A.34) نجد

$$C_{n\ell} = \left(\frac{e}{\hbar}\right)^3 \left(\frac{mZ}{4\pi\epsilon_0}\right)^{3/2} \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{\{(n+\ell)!\}^3}} \qquad (2.27)$$

وبناء على هذا نجد أن

$$\Psi_{n\ell m} = R_{n\ell}(x)\, Y_{\ell m}(\theta, \phi) \qquad (2.28)$$

حيث إن

$$x = \frac{mZe^2}{2\pi\epsilon_0 n \hbar^2} r = 2\frac{Zr}{a_0} \qquad (2.29)$$

وقد وضعنا

$$a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / me^2 \qquad (2.30)$$

وهو كما نعلم من الفيزياء الكمومية نصف قطر المدار الأدنى في ذرة الهيدروجين أو نصف قطر بور .

يظهر الجدول التالي بعض التوابع الموجية القطرية $R_{n\ell}$.

$R_{n\ell}(r)$
$R_{10} = (\frac{Z}{a_0})^{3/2} \cdot 2 \exp(-Zr/a_0)$
$R_{20} = (\frac{Z}{2a_0})^{3/2} \cdot 2(1 - \frac{1}{2}\frac{Zr}{a_0}) \exp(-Zr/2a_0)$
$R_{21} = (\frac{Z}{3a_0})^{3/2} \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{Zr}{a_0} \exp(-Zr/2a_0)$
$R_{30} = (\frac{Z}{3a_0})^{3/2} \cdot 2[1 - \frac{2}{3}\frac{Zr}{a_0} + \frac{2}{27}(\frac{Zr}{a_0})^2] \exp(-Zr/3a_0)$
$R_{31} = (\frac{Z}{3a_0})^{3/2} \frac{4\sqrt{2}}{3} \frac{Zr}{a_0}(1 - \frac{1}{6}\frac{Zr}{a_0}) \exp(-Zr/3a_0)$
$R_{32} = (\frac{Z}{3a_0})^{3/2} \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} (\frac{Zr}{a_0})^2 \exp(-Zr/3a_0)$

تمرين : احسب القيم المتوقعة لـ r و $\frac{1}{r}$ و r^2 في الحالة ψ_{100} .

§ (2.2) الاعداد الكوانتية :

اذا اغفلنا اعتبار السبين (وهو ما سندرسه قريبا) تتحدد حالة ذرة الهيدروجين بالاعداد الكوانتية :

العدد الكمي الرئيسي $\quad n = 1, 2, 3, \ldots.$

العدد الكمي المدارى $\quad \ell = 0, 1, 2, \ldots, (n-1) \qquad (2.31)$

العدد الكمي المغناطيسي $\quad m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm \ell$

يؤدى تحديد هذه الاعداد الى تحديد تابع الحالة

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi) \tag{2.32}$$

من الواضح ان تابعَي حالة من الشكل السابق يتعامدان اذا اختلف عدد كمي بينهما

$$\langle \Psi_{n\ell m} | \Psi_{n'\ell'm'} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

اذا كانت الذرة في حالة توافقها قيمة n للعدد الكمي الرئيس نقول ان الالكترون في الطبقة n . من المعتاد في الفيزياء الذرية ان نرمز الى الطبقات بحروف،ومثلا :

$$\begin{matrix} n = & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & \ldots \\ & K & L & M & N & O & \ldots \end{matrix}$$

من أجل كل قيمة لـ n توجد n قيمة ممكنة لـ ℓ ولذلك تنقسم الطبقة الى طبقات جزئية (او قشرات جزئية sub-shells) ، يرمز اليها في الفيزياء الذرية باعداد تحدد الطبقة وحروف لا تينية تحدد الطبقة الجزئية . يبين الجدول التالي الرموز الموافقة لبعض الطبقات الجزئية في ذرة الهيدروجين .

	s $\ell = 0$	p $\ell = 1$	d $\ell = 2$	f $\ell = 3$	g $\ell = 4$	h $\ell = 5$
$n = 1$	1s					
$n = 2$	2s	2p				
$n = 3$	3s	3p	3d			
$n = 4$	4s	4p	4d	4f		
$n = 5$	5s	5p	5d	5f	5g	
$n = 6$	6s	6p	6d	6f	6g	6h

تدل العلاقة (2.19) على أن الطاقة لا تتعلق بالعددين الكميين ℓ و m_ℓ،ومن (2.21) نحسب انه يوجد

$$(2\times0+1) + (2\times1+1) + \cdots + (2(n-1)+1)$$

$$= 1+3+5+\cdots+(2n-1)$$

$$= \frac{n}{2}[1+(2n-1)] = n^2$$

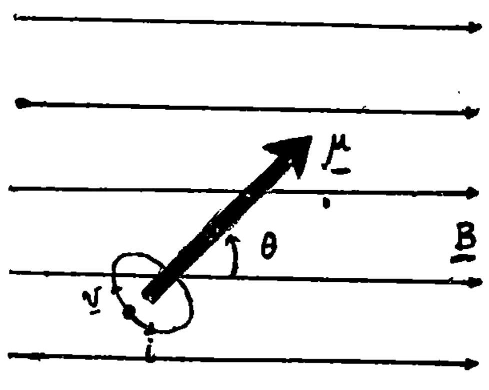
حالة (n, ℓ, m_ℓ) تقابل جميعا القيمة E_n نفسها للطاقة . اذا ادخلنا السبين بعين الاعتبار نجد أن هنالك $2n^2$ حالة (n, ℓ, m_ℓ, m_s) تقابل جميعها القيمة

E_n نفسها (نهمل في الافادة الاخيرة انشطار السوية E_n والناتج من تفاعل العزم الحركي المداري مع السبين) . ختاما لابد من أن نذكر من أن تحلل الطاقة هذا لا يبقى على ماهو عليه لما توضع الذرة في حقل مغناطيسي خارجي .

§ (2.7) كمومية الفراغ ومفعول زيمن :

يعين العدد الكوانتي ℓ طويلة العزم الحركي للذرة . لكن العزم الحركي هو كمية شعاعية ولذلك فالتعيين التام له يتطلب معرفة طويلته واتجاهه. لكن ما هي اهمية اتجاه العزم الحركي لذرة الهيدروجين ؟ تتوضح الاجابة عن هذا السؤال عندما ندرك ان الالكترون بدورانه حول النواة يؤلف تيارا ضئيلا ذا عزم مغناطيسي كذلك المتولد عن المزوج المغناطيسي (ثنائي اقطاب) . عندما يوجد مزوج مغناطيسي في حقل مغناطيسي خارجي $\underline{B}$ فانه يكتسب طاقة V_m تتعلق بشدة عزمه المغناطيسي $\underline{\mu}$ واتجاه هذا العزم بالنسبة الى الحقل . يعطى عزم القوة التي يتعرض لها المزوج في حقل مغناطيسي $\underline{B}$ بالعلاقة

$$\underline{\tau} = \underline{\mu} \times \underline{B}$$



(ش . 1)

يكون عزم القوة اعظميا عندما يتعامد المزوج $\underline{\mu}$ مع الحقل ومعدوما لما يكون موازيا (او معاكسا) له . لحساب الطاقة المغناطيسية الكامنة V_m، نتخذ موضعا نعتبره صفرا للطاقة الكامنة تعريفا ، وهو اختياري بالطبع مادامت الكمية المقيسة هي فرق الطاقة الكامنة لا الطاقة الكامنة نفسها . من المناسب ان نضع $V_m = 0$ من أجل $\theta = \pi/2$ أي عندما يتعامد $\underline{\mu}$ مع $\underline{B}$. تساوى الطاقة الكامنة في أي اتجاه آخر θ العمل الذى يحرره المزوج لدى دورانه من صفر الطاقة والمعين ب $\theta = \pi/2$ الى القيمة الكيفية $\theta = \theta$:

$$V_m = \int_{\pi/2}^{\theta} \tau \, d\theta$$

$$= \int_{\pi/2}^{\theta} \mu B \sin\theta \, d\theta$$

$$= -\mu B \cos\theta = -\underline{\mu} \cdot \underline{B} \quad (2.33)$$

عندما يؤشر $\underline{\mu}$ باتجاه $\underline{B}$ نفسه يكون $V_m = -\mu B$ وهي القيمة الصغرى للطاقة الكامنة. تعتبر هذه نتيجة طبيعية لحقيقةميل المزاوج المغناطيسية الى ترتيب نفسها باتجاه الحقل المغناطيسي . يعطى العزم المغناطيسي لتيار في عروة بالعلاقة

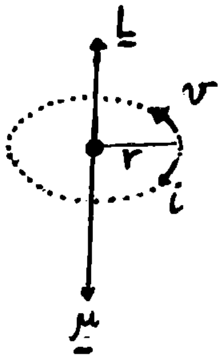
$$\mu = i A \quad (2.34)$$

حيث i شدة التيار و A السطح المحصور في العروة . يكافىء الالكترون الذى يدور ν دورة / ثانية في مدار دائرى نصف قطره r تيارا شدته $-e\nu$، وبذلك يكون عزمه المغناطيسي

$$\mu = -e\nu\pi r^2 \quad (2.35)$$

ومادامت السرعة الخطية للالكترون في مداره $v = 2\pi r \nu$ يكون عزمه الحركي

$$L = mvr = 2\pi m \nu r^2 \quad (2.36)$$



(ش ٢٠)

بمقارنة (2.35) مع (2.36) نجد

$$\underline{\mu} = -\frac{e}{2m} \underline{L} \quad (2.37)$$

تسمى النسبة ($-e/2m$) والتي تحتوى شحنةالالكترون وكتلتـــه فقط النسبة الجيرومغناطيسية. ينتج مـــن (2.33)، (2.37) ان الطاقة الكامنة لـــذرة الهيدروجين في حقل مغناطيسي

$$V_m = \frac{e}{2m} L B \cos\theta = \frac{e}{2m} \underline{L} \cdot \underline{B} \quad (2.38)$$

وجدنا في بحث العزم الحركي ان شدة $\hat{\underline{L}}$ مكممة

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar \qquad (2.39)$$

من الطبيعي اذن يكون اتجاه $\underline{L}$ بالنسبة الى الحقل المغناطيسي الخارجي مكمم ايضا . وكنا قد اطلقنا على هذه الحقيقة اسم كمومية الفراغ . يحدد العدد الكمي المغناطيسي اتجاه $\underline{L}$ وذلك بتعيين مركبته بالنسبة الى اتجاه الحقل الخارجي . باختيار المحور z باتجاه الحقل $\underline{B}$ يكون قيمة مركبة $\underline{L}$ في هذا الاتجاه

$$L_z = m_\ell \hbar \,. \qquad (2.40)$$

حيث ان $L_z = L\cos\theta$ ، نجد من (2.38) و(2.40) ان الطاقة المغناطيسية الكامنة لذرة عددها الكمي المغناطيسي m_ℓ عندما توضع في حقل مغناطيسي $\underline{B}$

$$V_m = m_\ell \left(\frac{e\hbar}{2m}\right) B$$

تسمى الكمية ($e\hbar/2m$) مغنيتون بور وقيمته 9.27×10^{-24} جول / (ويبر/متر٢)

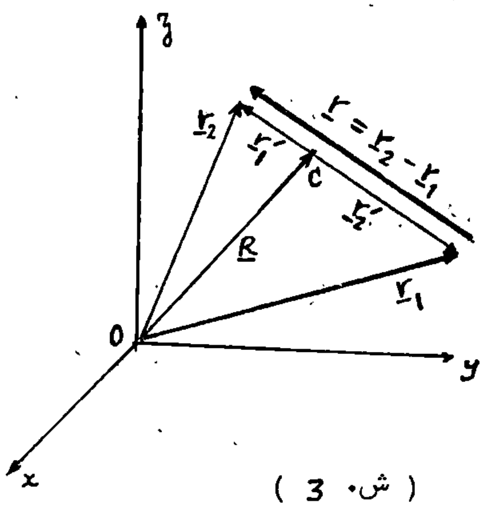
عندما تجد الذرة نفسها في حقل مغناطيسي تتوقف طاقة كل حالة على n و m_ℓ، وبذلك تنقسم الحالة المعينة بالعدد الكوانتي n الى حالات جزئية وطاقات هذه الحالات تزيد او تنقص قليلا عن طاقة الحالة لدى غياب الحقل . تقود هذه الظاهرة الى انقسام الخطوط الطيفية الى خطوط جزئية منفصلة عندما تشع الذرة في حقل مغناطيسي وتتعلق مواضع هذه الخطوط الجزئية بشدة الحقل . يطلق على ظاهرة انقسام الخطوط الطيفية بحقل مغناطيسي مفعول زيمن نسبة الى العالم الهولندي زيمن الذى لاحظها عام 1896 . يعتبر مفعول زيمن اثباتا لكمومية الفراغ.

برغم التحقق التجريبي من انقسام الخطوط الطيفية بسبب مفعول زيمن الا أن عدد هذه الانقسامات والمسافات الفاصلة بين الخطوط الجزئية التي يتنبأ بها هذا المفعول لا تتوافق مع التجربة في اغلب الاحيان .

38. مسألة القوة المركزية بين جسمين :

لنعتبر جملة مؤلفة من جسيمين كتلتيهما m_1 و m_2 يتبادلان التأثير فيما بينهما بقوة

تشتق من كمون V يتعلق فقط بالمسافة الفاصلة r . اما القوى الخارجية المؤثرة في الجملة فهي معدومة. لهذه الجملة ست درجات من الحرية ($\underline{r}_1, \underline{r}_2$) حيث $\underline{r}_1$ و $\underline{r}_2$ هما شعاعا موضعي الجسيمين . يمكن تعيين الجملة ايضا بمركبات شعاع مركز الكتلة $\underline{R}$ ومركبات شعاع الفرق $\underline{r} = \underline{r}_2 - \underline{r}_1$. حيث ان القوى الخارجية معدومة، فمركز الكتلة اما ساكن واما متحرك بحركة مستقيمة منتظمة . تساوى الطاقة الحركية T للجملة الطاقة الحركية الانسحابية لمركز الكتلة مضافا اليها الطاقة الحركية T' حول مركز الكتلة . لكن



(ش. 3)

$$T' = \frac{1}{2} m_1 \dot{\underline{r}}_1'^2 + \frac{1}{2} m_2 \dot{\underline{r}}_2'^2 \tag{3.1}$$

حيث $\underline{r}_1'$ و $\underline{r}_2'$ هما شعاعا موضعي الجسيمين بالنسبة الى مركز الكتلة ويرتبطان بالشعاع $\underline{r}$ بالعلاقتين :

$$\underline{r}_1' = -\frac{m_2}{m_1 + m_2} \underline{r} \quad , \quad \underline{r}_2' = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \underline{r} . \tag{3.2}$$

من (3.1) و (3.2) تكون

$$T' = \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{\underline{r}}^2 . \tag{3.3}$$

أما الطاقة الحركية T_c لمركز الكتلة فتساوى

$$T_c = \frac{1}{2} (m_1 + m_2) \dot{\underline{R}}^2 . \tag{7.4}$$

لنضع

$$M = m_1 + m_2 \ , \tag{3.5}$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \iff \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} . \tag{3.6}$$

يعطى الآن تابع لاغرانج او اللاغرانجيان $(L = T - V = T' + T_c - V)$ بالعبارة

$$L = \frac{1}{2} M \dot{\underline{R}}^2 + \frac{1}{2} \mu \dot{\underline{r}}^2 - V(r) \tag{3.7}$$

ويأخذ تابع هاميلتون الشكل

$$H = \frac{1}{2M} \underline{P}^2 + \frac{1}{2\mu} \underline{p}^2 + V(r) \tag{3.8}$$

تسمى μ الكتلة المختزلة للجملة . يدل أى من العلاقتين (3.7) او(3.8) على أنه يمكن ارجاع مسألة القوة المركزية بين جسيمين الى مسألة جسيم وحيد يتحرك في حقل مركزى متناظر بالنسبة الى مركز الكتلة يجرى مركزه حركة انسحابية .

لدراسة الحركة من الوجهة الكوانتية نمثل $\underline{P}$ و $\underline{p}$ بالموئثرين :

$$\hat{\underline{P}} = -i\hbar \nabla_R \tag{3.9}$$

$$\hat{\underline{p}} = -i\hbar \nabla_r \tag{3.10}$$

يكتب موئثر هاميلتون من أجل ذرة شبه هيدروجينية على الصورة

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \hat{\underline{P}}^2 + \frac{1}{2\mu} \hat{\underline{p}}^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{3.11}$$

بما أن دفع مركز الكتلة ـ وهو ليس سوى الدفع الانسحابي الكلي للذرة ـ لا يتعلق بـ $\underline{r}$ ، اذن يتآلف $\hat{\underline{P}}$ مع موئثر هاميلتون

$$[\hat{H}, \hat{\underline{P}}] = 0 . \tag{3.12}$$

يمكن اذن فصل طاقة الذرة الى قسمين هما الطاقة الداخلية للذرة

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2\mu} \hat{\underline{p}}^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{3.13}$$

والطاقة الانسحابية للذرة ككل والممثلة بالحد الأول من (3.11) . حيث ان الدفع $\hat{\underline{P}}$ والطاقة الداخلية للذرة $\hat{H}_0$ متآلفان ، اذن يمكن اختيار توابع موجية هي في آن واحد توابع خاصة لهذين الموئثرين .

يطابق الموئثر $\hat{H}_0$ في شكله موئثر الطاقة للذرة شبه الهيدروجينية والمعتبرة في

§2، حيث تم آنئذ اهمال حركة النواة واعتبرت تجاوزا مركزا للكتلة . ينتـــج إذن أن التوابع الخاصة للمؤثر $\hat{H}_0$ تتطابق مع الحلول السابقة في §2 ، مع فارق وحيد وهـــو استبدال الكتلة المختزلة للذرة بكتلة الالكترون . ان التوابع الموجية التي هي فـــي آن واحد توابع خاصة للطاقة الانسحابية للذرة ولطاقتها الداخلية لها الشكل

$$U_{\underline{P}n\ell} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\underline{P}\cdot\underline{R}\right) R_{n\ell}(r) \tag{3.19}$$

اما القيم الخاصة المتعلقة بهذا التابع فهي

$$\mathcal{E}_{\underline{P}n} = \frac{P^2}{2m} + E_n \tag{3.15}$$

حيث يمثل الحد الأول الطاقة الانسحابية للذرة

$$T_c = \frac{1}{2m}\left(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2\right). \tag{3.16}$$

ويمثل الحد الثاني الطاقة الداخلـية

$$E_n = -\frac{1}{2}\mu c^2\alpha^2\,\frac{Z^2}{n^2}. \tag{3.17}$$

تتحدد حالة الذرة $\Psi = U_{\underline{P}n\ell}Y_{\ell m}$ بستة اعداد كوانتيةوهي $(n, \ell, m, P_x, P_y, P_z)$. من الواضح ان القيم P_x و P_y و P_z التي تأخذها مركبات دفع مركز الكتلة $\underline{P}$ تؤلف طيوفا مستمرة .

لقد تم التحقق من صحة العبارة (3.15) او (3.17) لطاقة الذرة مـــن مقارنة طيوف الهيدروجين العادى ونظيريه الديتريوم والتريتيوم والتي تختلف عـــن بعضها بكتلها المختزلة اختلافا يمكن قياس اثره في السويات (3.17) .

لاحظ ان الحركة الانسحابية للذرة لا تؤثر في طيوفها لأن طيوف الذرات تنتج مـن انتقالاتها من سوية طاقة لاخرى ، وبما ان الطاقة الانسحابية ثابتة لذلك لا يظهـــر اثرها في الفرق بين سويتين .

§٤. الهزاز التوافقي الثلاثي البعد :

كمثال آخر على حركة جسيم في حقل مركزي ندرس الهزاز التوافقي الثلاثي البعد والمتماثل المناحي • يكتب موئثرها ميلتون الموافق لحالتنا بالصورة

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \qquad (4.1)$$

حيث ترمز μ الى الكتلة المختزلة للهزاز .

امامنا الان الخيار في أخذ مجموعة كاملة من التوابع الخاصة المشتركة للملحوظات المتآلفة $\hat{H}$ و $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ أو أن تأخذ مجموعة كاملة اخرى من التوابع الخاصة المشتركة للملحوظات المتآلفة $\hat{H}_x$ و $\hat{H}_y$ و $\hat{H}_z$ المعرفة العلاقات .

$$\begin{aligned} \hat{H}_x &= \frac{1}{2\mu}\hat{P}_x^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 , \\ \hat{H}_y &= \frac{1}{2\mu}\hat{P}_y^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 y^2 , \\ \hat{H}_z &= \frac{1}{2\mu}\hat{P}_z^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 z^2 . \end{aligned} \qquad (4.2)$$

بدلالة هذه الملحوظات يكتب موئثر هاميلتون بالشكل

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \qquad (4.3)$$

وبما ان الملحوظات المتآلفة $\hat{H}_x$ و $\hat{H}_y$ و H_z تتعلق بمتحولات مختلفة اذن يمكن ان نكتب التوابع الخاصة المشتركة على الصورة .

$$\Psi_{qrs}(x,y,z) = \Psi_q(x)\,\Psi_r(y)\,\Psi_s(z) \qquad (4.4)$$

حيث ان

$$\begin{aligned} \hat{H}_x \Psi_q(x) &= (q+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\, \Psi_q(x) , \\ \hat{H}_y \Psi_r(y) &= (r+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\, \Psi_r(y) , \\ H_z \Psi_s(z) &= (s+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\, \Psi_s(z) . \end{aligned} \qquad (4.5)$$

من الواضح ان التوابع الخاصة المشتركة (4.4) لهذه الملحوظات هي توابع خاصة

لـ $\hat{H}$ ايضا ، والمعادلة الخاصة الموافقة

$$H\psi_{qrs} = (q+r+s+\tfrac{3}{2})\hbar\omega\,\psi_{qrs} = (n+\tfrac{3}{2})\hbar\omega\,\psi_{qrs} \qquad (4.6)$$

يبين الجدول التالي مراتب تحلل طاقة بعض الحالات

سوية الطاقة	$n=0$	$n=1$	$n=2$	$n=3$
مرتبة التحلل	1	3	6	10

بالاعتماد على بحث الهزاز التوافقي البسيط تعطى الحالة الدنيا بالعلاقة .

$$\psi_{000} = \left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \exp\left(\frac{-\mu\omega}{2\hbar} r^2\right) \qquad (4.7)$$

وتستنتج كل الحالات ψ_{qrs} بدءاً من الحالات ψ_q و ψ_r و ψ_s في الهزاز الوحيد البعد

$$\psi_{qrs} = \left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} (2^n \cdot q!\, r!\, s!)^{-1/2} e^{-\frac{1}{2}\rho^2} H_q(\xi) H_r(\eta) H_s(\zeta) \qquad (4.8)$$

حيث إن

$$\xi = (\mu\omega/\hbar)^{1/2} x \,, \quad \eta = (\mu\omega/\hbar)^{1/2} y \,, \quad \zeta = (\mu\omega/\hbar)^{1/2} z \qquad (4.9)$$

$$\rho^2 = \xi^2 + \eta^2 + \zeta^2 \qquad (4.10)$$

§ 5 . اشعاع ذرة الهيدروجين :

رأينا في مقرر الفيزياء الكمومية ان بور استطاع بوضعه لمسلمات بارعة ان يفسر اشعاع ذرة الهيدروجين. سنرى الآن ان نظرية بور تنتج عن النظرية الكوانتية للعالم الميكروسكوبي مطبقة بصورة خاصة على ذرة الهيدروجين .

ان نقطة البدء في دراستنا هي الموضوعة المباشرة التالية : عندما يكون متوسط موضع الالكترون بالنسبة للنواة ثابتا فانه لا يصدر اى اشعاع ، اما اذا كان متوسط

موضع الالكترون يهتز فانه يصدر اشعاعا كهرطيسيا يساوى تواتره تواتر اهتزازالالكترون.

تعطى القيمة المتوقعة لموضع الالكترون عندما تكون الجملة في الحالة Ψ بالعلاقة

$$\langle \underline{r} \rangle = \langle \Psi | \underline{r} | \Psi \rangle \qquad (5.1)$$

اذا كان الالكترون في حالة خاصة معينة بالتابع ψ_{nlm} ، فان هذا التابع يتغير بمرور الزمن بحسب المعادلة

$$\Psi_{nlm}(\underline{r},t) = e^{-i\omega_n t}\,\psi_{nlm}(r) \quad , (\omega_n = E_n/\hbar) \qquad (5.2)$$

وتكون القيمة الوسطى لـ $\underline{r}$ في هذه الحالة المستقرة

$$\langle \underline{r} \rangle_{\psi_{nlm}} = \langle e^{-i\omega_n t}\psi_{nlm} | \underline{r} | e^{-i\omega_n t}\psi_{nlm} \rangle \qquad (5.3)$$

$$= \langle \psi_{nlm} | \underline{r} | \psi_{nlm} \rangle = \langle \underline{r} \rangle_{nlm} ,$$

وهي مستقلة عن الزمن كما نرى . فمتوسط موضع الالكترون لا يهتز اذن ، ولا يصدر من ثمّ اى اشعاع،وهكذا بيّنا انه عندما تكون الذرة في حالة مستقرة فانها لا تصدر اشعاعا وهي مسلمة بور الأولى .

لندرس الآن الحالة التي ينتقل فيها الالكترون من سوية الى اخرى ، ولنقم بصياغة المسألة بشكل محدد . لنفترض ان ذرة الهيدروجين كانت في حالتها الدنيا في اللحظة $t=0$ ، عندما بدأت عملية تهييج من نوع ما بالتأثير عليها (حزمة اشعاع ، او تصادم مع ذرات اخرى) ونجد إثر ذلك ان الذرة تصدر اشعاعا يوافق انتقالها من حالة مهيجة E_n الى الحالة الدنيا E_1 . ونستنتج من ذلك أنه في لحظة ما بين اللحظتين السابقتين كانت الذرة في حالة خاصة ψ_{nlm} .

بحسب المسلمة الثالثة يصف التابع الموجي

$$\Psi = a\,\Psi_{nlm} + b\,\Psi_{n'l'm'} \qquad (5.4)$$

حالة للالكترون يكون فيها موجودا في الحالة Ψ_{nlm} باحتمال قدره $|a|^2$ ، وفي الحالة $\Psi_{n'l'm'}$ باحتمال قدره $|b|^2$. اذا كان الالكترون في الحالة الأولى ($|a|^2=1$)

كانت القيمة المتوقعة لـ $\underline{r}$ مستقلة عن الزمن ولا يحدث اى اشعاع ، وكذلك اذا وجد الالكترون في الحالة $\psi_{n'\ell'm'}$ اما القيمة المتوقعة لـ $\underline{r}$ في الحالة ψ فهي

$$\langle \underline{r} \rangle_{\psi} = \langle a\psi_n + b\psi_{n'} | \underline{r} | a\psi_n + b\psi_{n'} \rangle \tag{5.5}$$
$$= |a|^2 \langle \underline{r} \rangle_n + |b|^2 \langle \underline{r} \rangle_{n'} + a^* b \langle \psi_n | \underline{r} | \psi_{n'} \rangle + b^* a \langle \psi_{n'} | \underline{r} | \psi_n \rangle$$

إن الحدين الأول والثاني مستقلان عن الزمن ، وأما الحدان الثالث والرابع فهما مترافقان ، ويكتب الحد الثالث مثلا بالشكل

$$e^{-i(\omega_n - \omega_{n'})t} a^* b \langle \psi_n | \underline{r} | \psi_{n'} \rangle$$
$$= (\rho_1 e^{i\alpha_1}, \rho_2 e^{i\alpha_2}, \rho_3 e^{i\alpha_3}) \; e^{i\omega_{nn'} t}$$

حيث ان

$$\omega_{nn'} = \omega_n - \omega_{n'} = (E_n - E_{n'})/\hbar$$
$$\rho_1 e^{i\alpha_1} = a^* b \langle \psi_n | x | \psi_{n'} \rangle \; , \; etc \ldots$$

ويكتب الحد الرابع على اعتبار انه المرافق العقدى للحد الثالث بالشكل

$$(\rho_1 e^{-i\alpha_1}, \rho_2 e^{-i\alpha_2}, \rho_3 e^{-i\alpha_3}) \; e^{-i\omega_{nn'} t}$$

وهكذا نكتب القيمة المتوقعة لاحداثي u حيث إن u يساوى x أو y أو z على الصورة

$$\langle u \rangle_{\psi} = |a|^2 \langle u \rangle_n + |b|^2 \langle u \rangle_n + 2\rho \cos(\omega_{nn'} t - \alpha) \tag{5.6}$$

وتدل هذه العلاقة على ان القيمة المتوقعة لـ u تهتز بسعة ρ وبتواتر زاوى

$$\omega_{nn'} = (E_n - E_{n'})/\hbar \tag{5.7}$$

ولهذا فان الالكترون يصدر اشعاعا كهرطيسيا نبضه $\omega_{nn'}$ وهي مسلمة بور الثانية .

ان المعالجة السابقة مبسطة جدا ، وسوف نتطرق الى دراسة مفصلة للموضوع في نظرية الاشعاع في مقرر ميكانيك الكم .

6§ . الانتقالات المحظورة وقواعد الاصطفاء

ليس من الضروري أن نعرف $|a|^2$ و $|b|^2$ كتابعين في الزمن ، او التابعين

الموجيين $\psi_{n'l'm'}$ و ψ_{nlm} لكي نعيّن نبض الاشعاع الصادر $\omega_{nn'}$. ولكن يجب معرفة هذه الكميات ان شئنا حساب المعدل الذى يتم وفقه اصدار الاشعاع . يمنع مبدأ الارتياب حساب قيم دقيقة لـ a و b من اجل ذرة واحدة . ولكن يمكن حساب القيمة المتوقعة لكل منهما من اجل عينة مؤلفة من ذرات متعددة .

نلاحظ أنه حتى عندما يكون a و b غير معدومين ، فان الانتقال بين الحالتين (n, l, m) و (n', l', m') يتم فقط اذا كان

$$u_{nn'} = \langle \psi_{nlm} | u | \psi_{n'l'm'} \rangle = u_{nlm,n'l'm'} \tag{6.1}$$

مختلفا عن الصفر ، وذلك لأن شدة الاشعاع تتناسب معه . تسمى الانتقالات التي يكون من اجلها $u_{nn'}$ مختلفا عن الصفر انتقالات ممكنة (او مسموحة) ، وتسمى تلك التي يكون فيها $u_{nn'}$ معدوما انتقالات محظورة .

عندما نأخذ $u = z$ مثلا ، يكون الاشعاع الصادر مكافئا لذاك الذى يصدر عن اونتان ثنائي القطب يقع على المحور z . وبالاستفادة من عبارات التوابع الموجية يكون

$$\begin{aligned} z_{nlm,n'l'm'} &= \int \psi^*_{nlm}\, z\, \psi_{n'l'm'}\, d\tau \\ &= \iiint R_{nl} R_{n'l'} P_l^m P_{l'}^{m'} e^{i(m'-m)\phi} r^3 \cos\theta \sin\theta \, dr\, d\theta\, d\phi \end{aligned} \tag{6.2}$$

حيث وضعنا $z = r\cos\theta$. وبفصل هذا التكامل يكون التكامل المتعلق بـ ϕ

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi}\, d\phi = \begin{cases} 2\pi & \text{if } m = m' \\ 0 & \text{if } m \neq m' \end{cases} \tag{6.3}$$

ويقود هذا الى قاعدة اصطفاء $m = m'$. بفرض ان المساواة الاخيرة محققة ، يصبح التكامل بالنسبة الى θ

$$\int_0^{\pi} P_l^m(\cos\theta) P_{l'}^m(\cos\theta) \sin\theta \cos\theta \, d\theta \tag{6.4}$$

ولقد تم حساب هذا التكامل في (A.27) حيث اظهرنا ان النتيجة معدومة الا اذا كان

$$l = l' + 1 \quad \text{or} \quad l' = l + 1 \tag{6.5}$$

وهي قاعدة اصطفاء اخرى . ويمكن الان حساب التكامل المتبقي بالنسبة الى r ، وهو

لا يقود الى قاعدة اصطفاء اخرى .

يحسب التكاملان (6.1) بالنسبة لـ x و y بطريقتين متشابهتين بعد وضع

$$x = r \sin\theta \cos\phi \qquad y = r \sin\theta \sin\phi$$

وفي حالة x نجد ان التكامل بالنسبة الى ϕ هو من الشكل

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} \cos\phi \, d\phi$$

ونرى بسهولة ان هذا التكامل ينعدم مالم يكن

$$m = m'+1 \quad or \quad m' = m+1$$

وهي قاعدة اصطفاء اضافية. فاذا تحققت المساواة الاولى ، يصبح التكامل بالنسبة الى θ

$$\int_0^{2\pi} P_\ell^m(\cos\theta)\, P_{\ell'}^{m-1}(\cos\theta) \sin^2\theta \, d\theta = \int_{-1}^{+1} \sqrt{1-\mu^2}\, P_\ell^m(\mu) P_{\ell'}^{m-1}(\mu)\, d\mu$$

وبالاستفادة من المتطابقة (A.11) يكتب هذا التكامل بالشكل

$$\frac{1}{2\ell'+1} \int_{-1}^{+1} P_\ell^m \left(P_{\ell'+1}^m - P_{\ell'-1}^m \right) d\mu$$

وينتج من (A.23) ان التكامل ينعدم مالم يكن

$$\ell = \ell'+1 \quad or \quad \ell' = \ell+1$$

وهذه النتيجة لا تزودنا بأية قاعدة اصطفاء جديدة . يمكن ايضا حساب عناصر المصفوفة الممثلة لـ y وهي لا تقود الى قواعد اصطفاء اضافية .

نلخص مما سبق بقولنا ان انتقالات الالكترون من حالة الى اخرى في حقل كروي التناظر (ليس فقط حقل كولون) تخضع الى قواعد الاصطفاء التالية

$$\Delta \ell = \pm 1 \;, \quad \Delta m = 0, \pm 1 \;, \quad \Delta n \text{ كيفي}$$

حيث ان $\Delta\ell = \ell' - \ell$ و $\Delta m = m' - m$. اما العدد الكوانتي الرئيسي n فلا قيد على تغيراته .وتحدد قواعد الاصطفاء السابقة الانتقالات المسموحة ، اما الانتقالات التي لا تحقق هذه القواعد فهي محظورة .

لكي نحصل على احساس بالأسس الفيزيائية لقواعد الاصطفاء هذه ، نرى انه الانتقال من الحالة $2p$ الى الحالة $1s$ يغير توزع الكثافة الاحتمالية الى توزع آخر

تسلك فيه الشحنة المهتزة خلال الانتقال سلوك او نتان ثنائي قطب كهربائي . امــا الانتقال من الحالة $2s$ الى الحالة $1s$ فهو يغير توزع الكثافة الاحتمالية من توزع متناظر كرويا الى آخر متناظر كرويا ايضا . ويعني هذا ان الاهتزاز الحادث يماثــل اهتزاز الشحنة في كرة مشحونة تتمدد وتنكمش بصورة متناوبة . واهتزاز من هذا النوع لا يصدر عنه اشعاع كهرطيسي .

تعني قاعدة الاصطفاء $\Delta \ell = \pm 1$ بأن الفوتون الصادر في الاشعاع يجــب أن يحمل عزما حركيا مساويا الفرق بين العزمين الحركيين للذرة في حالتيهــا الابتدائية والنهائية . اما الشبه الكلاسيكي لفوتون يملك عزما حركيا فهو موجه كهرطيسية مستقطبة دائريا .

§ 7 . قواعد الاصطفاء للهزاز التوافقي

بحساب عنصر المصفوفة الممثلة لـ x والموافق لانتقال من الحالة (r, q, s) الى الحالة (r', q', s') نجد :

$$x_{rqs,r'q's'} = \int \psi^*_{rqs}\, x\, \psi_{r'q's'}\, d\tau$$
$$= (\hbar/m\omega)^2 \iiint \psi^*_{rqs}\, \xi\, \psi_{r'q's'}\, d\xi\, d\eta\, d\zeta\ .$$

من الممكن البرهان بحسب العلاقات التكرارية التي تحققها كثيرات حدود هرميت أن

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \xi e^{-\xi^2} H_i(\xi) H_j(\xi)\, d\xi = 2^i (i+1)!\sqrt{\pi} \quad \text{if } j = i+1$$
$$= 2^j (j+1)!\sqrt{\pi} \quad \text{if } i = j+1$$
$$= 0 \quad \text{فيما عدا ذلك}$$

وبحسب (VI .A.21) لدينا

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\eta^2} H_i(\eta) H_j(\eta)\, d\eta = 2^i\, i!\sqrt{\pi}\ \delta_{ij}$$

وبحسب النتيجتين السابقتين نجد

$$x_{rqs,r'q's'} = [\hbar(r+1)/2m\omega]^{1/2} \quad \text{if } r' = r+1,\ q' = q,\ s' = s$$
$$= [\hbar(r'+1)/2m\omega]^{1/2} \quad \text{if } r = r'+1,\ q = q',\ s = s'$$
$$= 0 \quad \text{فيما عدا ذلك}$$

ويمكن الحصول على نتائج مماثلة بخصوص عناصر المصفوفتين المثلثتين ل y و z .

ونستنتج الان ، انه في الهزاز التوافقي تكون كل الانتقالات محظورة الا تلك التي يتغير بها احد الاعداد الكوانتية r أو q أو s زيادة او نقصانا بواحد صحيح. ومن اجل انتقالات كهذه تتغير E بالمقدار $\hbar\omega$ ولذلك يتألف طيف الهزاز التوافقي من خط برّاق واحد .

A § . كثيرات حدود لاغيور

لقد جابهنا المعادلة

$$xy'' + (k+1-x)y' + ny = 0$$

حيث n و k عددان صحيحان موجبان او صفر . ولقد رأينا ان لهذه المعادلة حل على شكل كثير حدود (ويبرهن ان الحل كثير الحدود وحيد بغض النظر عن ثابت ضرب كيفي) من الدرجة n . اذا اخترنا عامل ضرب الحد x^n مساويا الى $(n+k)!/n!$ $(-1)^{n+k}$ ، سمي كثير الحدود كثير حدود لاغيور المعمم من الدرجة n والمرتبة k ، ويرمز له بالرمز $L_n^k(x)$ ، ويكون عامل x^n فيه $(-1)^n$.

نحصل على كثيرات حدود لاغيور العادية بوضع $k=0$ في $(A.1)$ ، ويرمز لكثير حدود لاغيور العادي من المرتبة n بالرمز $L_n(x)$ ، وهو يحقق المعادلة

$$xy'' + (1-x)y' + ny = 0$$

يحقق كثير حدود لاغيور العادي L_{n+k} المعادلة

$$xy'' + (1-x)y' + (n+k)y = 0 \tag{A.2}$$

وباشتقاق هذه المعادلة k مرة نجد

$$xy^{(k+2)} + (k+1-x)y^{(k+1)} + ny^{(k)} = 0 \tag{A.3}$$

وبمقارنة المعادلتين (A.3) و (A.1) نستنتج انه اذا كان L_{n+k} حل كثير حدود للمعادلة (A.2) فان $L_{n+k}^{(k)}$ يكون حل كثير حدود للمعادلة (A.1)

وبناء عليه نجد

$$L_n^k(x) = c\, L_{n+k}^{(k)}(x) \tag{A.4}$$

حيث c ثابت . وبما ان عامل x^{n+k} في كثير حدود لاغيور العادى L_{n+k} هـــو $(-1)^{n+k}$، يكون عامل x^n في $L^{(k)}_{n+k}$ مساويا الى $(n+k)!/n!$ $(-1)^{n+k}$ ، وهو عامل L^k_n نفسه . بناء على هذا نرى ان $c=1$ ، ويكون

$$L^k_n(x) = d^k L_{n+k}(x)/dx^k .$$

ندخل الان متحولا تابعيا z في المعادلة (A.1) نعرفه بالعلاقة

$$y = x^{-k} e^x z$$

ونـــرى ان المعادلة (A.1) تصبح في التابع الجديد على الشكل

$$x z'' + (x-k+1) z' + (n+1) z = 0 \qquad (A.7)$$

وبوضع

$$z = d^n w/dx^n \qquad (A.8)$$

تكتب المعادلة (A.7) بالشكل

$$x w^{(n+2)} + (x-k+1) w^{(n+1)} + (n+1) w^{(n)} = 0 \qquad (A.9)$$

التي تكافىء بحسب قاعدة ليبنز

$$\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} \{ x w' + (x-n-k) w \} = 0 \qquad (A.10)$$

ولكن المعادلة

$$x w' + (x-n-k) w = 0 \qquad (A.11)$$

تقبل الحل

$$w = A e^{-x} x^{n+k} \qquad (A.12)$$

وينتج منها ان

$$y = A e^{-x} x^{-k} \frac{d^n}{dx^n} [e^{-x} x^{n+k}]$$

هو حل للمعادلة (A.1) . بتطبيق قاعدة ليبنتز نرى ان هذا الحل كثير حـــدود يساوى عامل الحد x^n فيه القيمة $(-1)^n A$. وبأخذ $A = (-1)^k (n+k)!/n!$ يصبح كثير الحدود هذا منطبقا مع L^k_n . وهكذا نكون قد برهنا ان :

$$L^k_n(x) = (-1)^k \frac{(n+k)!}{n!} e^x x^{-k} \frac{d^n}{dx^n} [e^{-x} x^{n+k}] \qquad (A.14)$$

وفي حالة خاصة وبأخذ $k=0$ نجد

$$L_n(x) = e^{x} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n) \qquad (A.15)$$

سوف نستخرج الآن بعض خواص كثيرات حدود لاغيور العادية . بتطبيق قاعدة ليبنتز على العلاقة (A.15) نجد الشكل الصريح لكثير حدود لاغيور العادى

$$L_n(x) = e^{+x}\sum_{r=0}^{n}\binom{n}{r}(e^{-x})^{(r)}(x^n)^{(n-r)} = \sum_{r=0}^{n}\binom{n}{r}(-1)^r \frac{n!}{r!} x^r \qquad (A.16)$$

$$= n!\sum_{r=0}^{n}\binom{n}{r}\frac{(-x)^r}{r!}$$

حيث $\binom{n}{r}$ هي عامل كثير الحدود . وتكون كثيرات حدود لاغيور العادية الخمسة الاولى

$$L_0 = 1 \;,\; L_1 = 1 - x \;,\; L_2 = 2 - 4x + x^2$$

$$L_3 = 6 - 18x - 9x^2 - x^3 \;,\; L_4 = 24 - 96x + 72x^2 - 16x^3 + x^4 \qquad (A.17)$$

تحسب كثيرات حدود حدود المعممة بدءً من كثيرات حدود لاغيور العادية عن طريق الاشتقاق وفقا للعلاقة (A.5) .

يمكن ان نجد علاقة تدرج بين كثيرات حدود لاغيور العادية L_n باستخدام العلاقة (A.15) . بكتابة هذه العلاقة بالشكل

$$L_n = e^{x} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n-1} x) \qquad (A.18)$$

وتطبيق ليبنتز نجد

$$L_n = e^{x}\left\{x \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x} x^{n-1}) + n \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(e^{-x} x^{n-1})\right\} \qquad (A.19)$$

$$= x e^{x} \frac{d}{dx}(e^{-x} L_{n-1}) + n L_{n-1}$$

$$= (n - x) L_{n-1} + x L'_{n-1}$$

وبما ان L_{n-1} يحقق المعادلة (A.1) بعد وضع $k = 0$ واستبدال $n-1$ بـ n لذلك نجد

$$x L''_{n-1} + (1 - x) L'_{n-1} + (n-1) L_{n-1} = 0 \qquad (A.20)$$

باشتقاق المعادلة (A.19) نجد

$$L'_n = x L''_{n-1} + (n+1-x) L'_{n-1} - L_{n-1} \qquad (A.21)$$

بحذف L''_{n-1} بين (A.20) و (A.21) نحصل على النتيجة

$$L'_n = n(L'_{n-1} - L_{n-1}) \qquad (A.22)$$

من المعادلتين (A.19) و (A.22) ينتج ان

$$x L'_n = n L_n - n^2 L_{n-1} \qquad (A.23)$$

بكتابة هذه المعادلة من اجل ($n-1$)

$$x L'_{n-1} = (n-1) L_{n-1} - (n-1)^2 L_{n-2} \qquad (A.24)$$

والتعويض من هذه المعادلة ومن (A.23) من اجل L'_{n-1} و L'_n على الترتيب في المعادلة (A.22) نجد علاقة التدرج التالية

$$L_{n+1} - (2n+1-x) L_n + n^2 L_{n-1} = 0 \qquad (A.25)$$

(وقد بدلنا فيها كل n بـ ($n+1$)) . يمكن استنتاج صيغ تدرج مختلفة تتعلق بكثيرات حدود لاغيور المعممة وذلك باشتقاق العلاقة السابقة والاستفادة من (A.5).

تحقق كثيرات حدود لاغيور المعممة شرط التعامد ، لنعتبر التكامل التالي

$$\int_0^\infty e^{-x} x^k L_n^k L_m^k \, dx \qquad (A.26)$$

حيث نفترض دون فقدان طابع التعميم أن $n \geq m$. بالتعويض من اجل L_n^k من المعادلة (A.14) يأخذ الشكل التكامل

$$(-1)^k \frac{(n+k)!}{n!} \int_0^\infty \frac{d^n}{dx^n} [e^{-x} x^{n+k}] L_m^k \, dx$$

باجراء التكامل n مرة بالتجزئة وملاحظة ان الجزء الواقع خارج التكامل يكون دوما معدوما لانه يحتوى دوما على عامل ضرب $x e^{-x}$ وهو معدوم على طرفي مجال التكامل 0 و $+\infty$ ، نصل الى النتيجة التالية

$$(-1)^{n+k} \frac{(n+k)!}{n!} \int_0^\infty e^{-x} x^{n+k} \frac{d^n}{dx^n} L_m^k \, dx \qquad (A.27)$$

اذا كان $n > m$ ،كان المشتق النوني لكثير الحدود من الدرجة m وهو L_m^k معدوما وبالتالي يكون التكامل معدوما . اذا كان $n = m$ وجدنا

$$(A.28)\qquad \frac{d^n}{dx^n} L_n^k = (-1)^{n+k} (n+k)!$$

وبناء عليه نجد

$$\int_0^\infty e^{-x} x^{n+k} dx = (n+k)!$$

ينتج من هذا ان

$$(A.30)\qquad \int_0^\infty e^{-x} x^k L_n^k L_m^k dx = \frac{\{(n+k)!\}^3}{n!} \delta_{mn}$$

نحسب الان بضعة تكاملات اخرى مشابهة للنمط السابق لأنها تبرز في سياق الكتاب ، وطريقة حسابها مشابهة للطريقة السابقة . وهكذا نرى أن

$$(A.31)\qquad \int_0^\infty e^{-x} x^{k+1} \{L_n^k\}^2 dx = (-1)^k \frac{(n+k)!}{n!} \int_0^\infty \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x} x^{n+k}) x L_n^k dx$$

$$= (-1)^{n+k} \frac{(n+k)!}{n!} \int_0^\infty e^{-x} x^{n+k} \frac{d^n}{dx^n}(x L_n^k) dx$$

وذلك بعد اجراء n عملية مكاملة بالتجزئة كما سبق . من العلاقة (A.14) وبالاستفادة من قاعدة ليبنتز نجد

$$(A.32)\qquad L_n^k = (-1)^{n+k} \frac{(n+k)!}{n!} \{x^n - n(n+k)x^{n-1} - \frac{1}{2} n(n-1)(n+k-1)x^{n-2} + \dots$$

وبناء عليه نجد

$$(A.33)\qquad \frac{d^n}{dx^n}(x L_n^k) = (-1)^{n+k} (n+k)! [(n+1)x - n(n+k)]$$

وبالاستفادة من المعادلتين (A.29) و (A.31) نحصل على

$$(A.34)\qquad \int_0^\infty e^{-x} x^{k+1} \{L_n^k\}^2 dx = (2n+k-1)\{(n+k)!\}^3 / n!$$

لنفترض الان ان $k \geq 1$ ، فيكون لدينا

$$\int_0^\infty e^{-x} x^{k-1} \{L_n^k\}^2 dx = (-1)^k \frac{(n+k)!}{n!} \int_0^\infty x^{-1} L_n^k \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x} x^{n+k}) dx$$

$$(A.35)\qquad = (-1)^{n+k} \frac{(n+k)!}{n!} \int_0^\infty e^{-x} x^{n+k} \frac{d^n}{dx^n}(x^{-1} L_n^k) dx$$

من المعادلة (A.14) نجد

$$(A.36)\qquad L_n^k = (-1)^k \frac{\{(n+k)!\}^2}{n!\,k!}\left[1 - \frac{n}{k+1}x + \cdots\right]$$

ومنه نجد

$$(A.37)\qquad \frac{d^n}{dx^n}\left(x^{-1}L_n^k\right) = (-1)^{k+n}\frac{\{(n+k)!\}^2}{k!}\frac{1}{x^{n+1}}$$

وهكذا يكون

$$(A.38)\qquad \int_0^\infty e^{-x}x^{k-1}\{L_n^k\}^2 dx = \frac{\{(n+k)!\}^3}{n!\,k!}$$

بشكل مشابه واذا كان $k \geqslant 2$ ، فنبرهن ان

$$(A.39)\qquad \int_0^\infty e^{-x}x^{k-2}\{L_n^k\}^2 dx = \frac{\{(n+k)!\}^3(2n+k+1)}{n!\,k(k^2-1)}$$

وختاما نحسب من اجل $k \geqslant 2$ مايلي

$$\int_0^\infty e^{-x}x^{k+1}L_n^k L_{n+1}^{k-2}dx$$

$$= \frac{(n+k-1)!}{(n+1)!}\int_0^\infty x^3 L_n^k \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}\left[e^{-x}x^{n+k-1}\right]dx$$

$$(A.40)\qquad = (-1)^{n+k+1}\frac{(n+k+1)!}{(n+1)!}\int_0^\infty e^{-x}x^{n+k-1}\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}\left(x^3L_n^k\right)dx$$

وبالتعويض من اجل L_n^k من المعادلات ($A.32$) نجد ان

$$(A.41)\qquad \int_0^\infty e^{-x}x^{k+1}L_n^k L_{n+1}^{k-2}dx = -\frac{3(2n+k+1)\{(n+k)!\}^3}{n!\,(n+k)}$$

§ B . اللابلاسيان في الاحداثيات المعممة

ليكن (x^3 ، x^2 ، x^1) احداثيات معممة في الفراغ . نكتب المسافة في هذه الجملة الاحداثية بالشكل

$$dS^2 = \sum_{i,j} g_{ij}\,dx^i dx^j = g_{ij}\,dx^i dx^j$$

حيث تم هنا اعتماد اصطلاح الجمع . تسمى ($[g_{ij}]$) مصفوفة المسافة ، ويمكن أن تؤخذ هذه المصفوفة متناظرة . نرمز لمعين المصفوفة ($[g_{ij}]$) بالرمز g ، ولمقلوبها بالرمز ($[g^{ij}]$) ، أى أن

$$g = |g_{ij}| \quad , \quad (g^{ij}) = (g_{ij})^{-1}$$

فيكون

$$g_{ij}\, g^{ik} = \delta_j^k \quad , \quad g_{ij}\, g^{kj} = \delta_i^k$$

يبرهن في الحساب التنسورى ان عبارة لا بلاسيان تابع $\nabla^2 \psi = div\ grad\ \psi$ تأخذ الشكل

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\sqrt{g}\, g^{ij} \frac{\partial}{\partial x^j} \right)$$

وبالطبع تعني العلاقة السابقة ان ثمة جمع مضاعف على i و j .

في الاحداثيات القطبية يكون عنصر المسافة ds^2 معطى بالعلاقة

$$ds^2 = dr^2 + r^2 \sin^2\theta\, d\phi^2 + r^2 d\theta^2$$

أى ان

$$[g_{ij}] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2\sin^2\theta & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \end{pmatrix} \Rightarrow g = r^4 \sin^2\theta$$

$$[g^{ij}] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/r^2\sin^2\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1/r^2 \end{pmatrix}$$

وبسبب ان ($[g_{ij}]$) قطرية تنعدم الحدود التي تكون فيها $i \neq j$ ونجد

$$\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{g}} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(\sqrt{g}\, g^{11} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\sqrt{g}\, g^{22} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sqrt{g}\, g^{33} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right\}$$

$$= \frac{1}{r^2 \sin\theta} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \sin\theta \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right\}$$

$$= \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

§ C . اذا كانت

(i) $\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$ و $\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n$ سلسلتان متناويتان من اجل $|x|<\rho$

(ii) $a_n > 0$ و $b_n > 0$ من اجل $n \geqslant n_0$.

(iii) $(a_n / a_{n-1}) \geqslant (b_n / b_{n-1}) \quad \forall n > n_0$

فعندئذ يكون من اجل $0 < x < \rho$

$$\sum_{0}^{\infty} a_n x^n \geqslant k \sum_{0}^{\infty} b_n x^n + P(x)$$

حيث k عدد موجب و $P(x)$ كثير حدود من درجة اصغر من n_0.

برهان : اذا كان $n \geqslant n_0$ كان

$$a_n = \frac{a_n}{a_{n-1}} \frac{a_{n-1}}{a_{n-2}} \cdots \frac{a_{n_0+1}}{a_{n_0}} a_{n_0}$$

$$\geqslant \frac{b_n}{b_{n-1}} \frac{b_{n-1}}{b_{n-2}} \cdots \frac{b_{n_0+1}}{b_{n_0}} a_{n_0} = k b_n$$

حيث $k = a_{n_0} / b_{n_0}$. ينتج الان انه اذا كان $0 < x < \rho$ فان

$$\sum_{n_0}^{\infty} a_n x^n \geqslant k \sum_{n_0}^{\infty} b_n x^n$$

وبأخذ

$$P(x) = \sum_{0}^{n_0-1} a_n x^n - k \sum_{0}^{n_0-1} b_n x^n$$

يتم البرهان على المتراجحة المطلوبة .

* * *

الفصل العاشر

نظرية الاضطراب

§ ١. مقدمة :

باستثناء ذرة الهيدروجين وبعض شوارد العناصر الخفيفة ، تحتوى كل الذرات على الكترونات متعددة . وتبعا لهذا ان لمسألة الذرة ذات الالكترون الوحيد اهمية محدودة ، ولكن الحقيقة خلاف ذلك فدراسة الذرات ذات الالكترون الوحيد ذات اهمية اساسية في فهم ومعالجة الذرات ذات الالكترونات المتعددة .

تأتي اولى الصعوبات في الذرات المتعددة الالكترونات من استحالة وصف حركة الالكترون بحد ذاته وبصرف النظر عن حركة الالكترونات الاُخرى . بالاضافة الى التفاعل الكهربائي لكل الكترون مع النواة يجب ان يؤخذ بعين الاعتبار التفاعل المتبادل بين الالكترونات . واذا اعتبرنا الطاقة الكامنة لاُحد الالكترونات i وهي (في الجملة السفثية)

$$V_i = -\frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} \frac{e^2}{r_{ij}}$$

حيث يرمز r_i الى بعد الالكترون i عن النواة و r_{ij} الى بعد الالكترون i عن الالكترون j و N الى العدد الكلي للالكترونات ، وجدنا انه ينتج من الحد الاخير وهو تابع في احداثيات جميع الالكترونات ارتباط في حركة كل الكترون بحركة كل من الالكترونات المتبقية . ويقود هذا الى انتفاء امكانية اعتبار حركة كل الكترون بصورة مستقلة عن الالكترونات الاخرى . وعلى هذا يصبح مستحيلا التحدث عن التابع الموجي لكل الكترون وانما عن التابع الموجي لكل الذرة ، ولنفس السبب يصبح من غير ذى معنى

التحدث عن طاقة كل من هذه الالكترونات على حدة ، وانما يجب التحدث عن طاقة الذرة (او الايون) ككل :

$$V = \sum_{i=1}^{N} -\frac{ze^2}{r_i} + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{e^2}{r_{ij}} \tag{1.2}$$

لقد تحدثنا عن طاقة الالكترون i وكأننا يمكن ان نميز الالكترونات عن بعضها باشعة $\underline{r}_i$ تعين مواضعها، وهو فرض غير صحيح. فالالكترونات جسيمات غير متمايزة وسوف نرى تفصيلا اوسع عن هذا الموضوع لدى دراسة الجسيمات المتطابقة والتكميم الثاني في ميكانيك الكم II .

نذكر من البدء ان مسألة الالكترونات المتعددة لا يمكن ان تحل بطريقة تحليلية وإنما يجب ان نلجأ دوما الى تقريبات من مراتب مختلفة . سوف نوضح طرائق التقريب هذه لدى معالجتنا لذرة الهيليوم .

§2. ذرة الهيليوم :

تعقب هذه الذرة ذرة الهيدروجين في الجدول الدوري . تتركب نواة هذه الذرة من بروتونين شحنة كل منهما $+e$ ونيوترونين معتدلي الشحنة ، ويتحرك حول النواة الكترونان شحنة كل منهما $-e$.

تكتب معادلة شرودنجر لهذه الذرة على فرض ان النواة ساكنة بالشكل

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2+\nabla_2^2) - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}\right]\Psi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) = E\Psi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) \tag{2.1}$$

ولقد أشرنا الى احداثيات اللالكترونين بالرمزين $\underline{r}_1$ و $\underline{r}_2$ تحت افتراض ان الالكترونين متمايزان ، وهو افتراض نعلم مسبقا بأنه غير صحيح . ولكن سبين الالكترون يساوى 1/2 ويمكن ان يوجد الالكترون في احدى حالتين جزئيتين ، يتجه في اولاهما

السبين الاعلى وفي الثانية الى الاسفل . لهذا السبب تستطيع فرضية الالكترونين المتمايزين (ولكن ليس اكثر من الكترونين اثنين) ان تبقى وتستخدم في حل المعادلة (2.1). بامكاننا ان ننظر الى احد الالكترونين بأن له سبين يتجه للاعلى وللآخر بأن له سبين يتجه للاسفل ، وكأن الالكترونين ينتميان الى نوعين مختلفين من الجسيمات الالكترونية . اما التصحيح الواجب اجراءه على هذه الصورة ، بسبب تطابق الالكترونين المتفقين بالحالة السبينية وبسبب مبدأ باولي، فسوف نتعرض له لدى دراسة الجسيمات المتطابقة في ميكانيك الكم II .

بسبب تناظر موئثرها ميلتون في (2.1) تقع حلول معادلة شرودنجر

$$\mathcal{H}\,\Psi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) = E\,\Psi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) \tag{2.2}$$

في صفين رئيسيين ، اذ يمكن ان نفترض ان كل حل اما ان يكون متناظرا او ضد متناظر في r_1 و r_2

$$\Psi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) = \pm\,\Psi(\underline{r}_2,\underline{r}_1) \tag{2.3}$$

واذا اخفق حل خاص $\phi(\underline{r}_1,\underline{r}_2)$ في تحقيق الخاصة السابقة ، فانا نلاحظ ان $\phi(\underline{r}_2,\underline{r}_1)$ هو حل خاص لشرودنجر ايضا وذلك بسبب تناظر $\mathcal{H}$ في $\underline{r}_1$ و $\underline{r}_2$. تعرف ظاهرة ظهور هذين الحل باسم التحلل المتبادل ، وذلك لأن كلا الحلين يتعلقان بقيمة خاصة E نفسها . وبسبب خطية موئثر هاميلتون نرى ان التركيبين الخطين

$$\begin{aligned} \Psi_+(\underline{r}_1,\underline{r}_2) &= \phi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) + \phi(\underline{r}_2,\underline{r}_1) \\ \Psi_-(\underline{r}_1,\underline{r}_2) &= \phi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) - \phi(\underline{r}_2,\underline{r}_1) \end{aligned} \tag{2.4}$$

هما حلان لشرودنجر يقابلان القيمة الخاصة E نفسها . وبما ان كل حل $\phi(\underline{r}_1,\underline{r}_2)$ يكتب بحسب العلاقتين السابقتين كتركيب خطي في حلول ذات تناظر معين

$$\phi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) = \tfrac{1}{2}\Psi_+(\underline{r}_1,\underline{r}_2) + \tfrac{1}{2}\Psi_-(\underline{r}_1,\underline{r}_2) \tag{2.5}$$

لذلك لا نحتاج الا الى اعتبار الحلول المتناظرة او ضد المتناظرة لمعادلة شرود نجـــره

لا يمكن حل المعادلة (2.1) بصورة تحليلية بسبب وجود الحد e^2/r_{12} الذى يمثل التدافع بين الالكترونين . وهذا الحد هو وضوحا من مرتبة القوة الكولونيـــــة الجاذبـة المطبقة على الالكترونين . ولهذا فان اهماله لا يؤدى غرضاً سوى تبسيـــط المعادلة (2.1)، ونتوقع سلفا بأنا لن نحصل على نتائج مرضية . تكتب (2.1) بعد اهمال الحد الممثل للتفاعل بين الالكترونين على الشكل

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2+\nabla_2^2) - 2e^2\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)]\,\Psi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) = \mathcal{E}\,\Psi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) \qquad (2.6)$$

وهذه المعادلة تقبل الفصل الى معادلتين من شكل معادلة ذرة الهيدروجين

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{2e^2}{r_1}\right)\psi_a(\underline{r}_1) = \mathcal{E}_a\,\psi_a(\underline{r}_1) \qquad (2.7)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_2}\right)\psi_b(\underline{r}_2) = \mathcal{E}_b\,\psi_b(\underline{r}_2) \qquad (2.8)$$

حيث ان

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_a + \mathcal{E}_b \qquad (2.9)$$

$$\Psi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) = \psi_a(\underline{r}_1)\,\psi_b(\underline{r}_2) \qquad (2.10)$$

بناء على المعادلتين (2.7) و (2.8) تعطى سويات طاقة كل الكترون (فيما لو يكـن ثمة تفاعل مع الالكترون الآخر) بالعلاقة

$$\mathcal{E}_{n_i} = -\frac{1}{2} m c^2 \alpha^2 Z^2 / n_i^2 \qquad (i = 1, 2) \qquad (2.11)$$

حيث ان α ثابت البنية الدقيقة و c سرعة الضوء . وتكون سويات طاقة الذرة

$$\mathcal{E}_{n_1 n_2} = -\frac{1}{2} m c^2 \alpha^2 Z^2\left(\frac{1}{n_1^2}+\frac{1}{n_2^2}\right) \qquad (2.12)$$

اما السوية الدنيا للذرة فتقابل $n_1 = 1$ و $n_2 = 1$ ونجد منها (بعد ملاحظـــة أن

$$\varepsilon_{a_1} = \varepsilon_{b1} = -4 \times 13.6\, eV = -54.4\, eV \tag{2.13}$$

وان

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon_{a1} + \varepsilon_{b1} = -108.8\ eV . \tag{2.14}$$

ويكون التابع الموجي الموافق جداء تابعين هيدروجينيين في الحالة $1s$

$$\psi_+ = 4\frac{Z^3}{a_0^3} \exp[-Z(r_1 + r_2)/a_0] \tag{2.15}$$

وهو تابع متناظر لدى مبادلة الجسيمين فيمابينهما ، أي لدى مبادلة $\underline{r}_1$ و $\underline{r}_2$ فيما بينهما .

تدل التجربة على أن الطاقة الدنيا لذرة الهيليوم تساوى $-78.9\ eV$. يعود الفرق الكبير بين القيمة المحسوبة (2.14) والقيمة التجريبية الى اهمال الحد e^2/r_{12} الممثل لقوة التدافع بين الالكترونين . لكن ادخال هذا الحد يمنع ، كما اسلفنا ذكره ، حل معادلة شرودنجر حلا تحليليا ، ولذا نجدنا مضطرين الى التوقف عن حل ذرة الهيليوم عند هذا الحد ، ودراسة طرق التقريب التي تمكننا من ايجاد نتائج مرضية حولها .

§3 . تعريف الاضطراب :

تعود معظم المسائل في ميكانيك الكم ، ومسألة ذرة الهيليوم من ابسطها ، الى معادلات معقدة لدرجة يستحيل حلها بصورة تحليلية . ان الحلول التامة لمعادلة شرودنجر يمكن ان تحسب في عدد ضئيل من الحالات السهلة جدا . ويظهر غالبا في معطيات المسألة مقادير من مراتب مختلفة في الشدة ، ومن بين هذه المقادير قد يوجد بعضها بحيث ان حذفه يؤدى الى تبسيط بالغ في المسألة ، مما ينتج

عنه امكانية حلها حلا تاما . في مثل هذه الحالات تبدأ الخطة في حل المسألة المعطاة بخطوة اولى هي حل المسألة المبسطة وفي الخطوة الثانية حساب الاخطاء الناتجة عن اهمال الحدود الصغيرة في المسألة المبسطة.تسمى الطريقة التي تحسب بها هذه الاخطاء نظرية الاضطراب .

بالحقيقة ، انا ندعو اضطرابا قوة صغيرة توثر في جملة ما ، ويؤدي هذا الى تغير طفيف في حالة الجملة وفي طاقتها . يشكل حقل مغناطيسي ضعيف مثلا اضطرابا في حالات ذرة الهيدروجين وسويات طاقتها . تسمى الحالة الأصلية للذرة قبل تعرضها للحقل الحالة غير المضطربة ، وتسمى حالتها بعد تعرضها للحقل الحالة المضطربة . وكذلك توصف طاقة الذرة بأنها غير مضطربة قبل تعرضها للحقل وانها مضطربة بعد تعرضها له . ليس من الضروري ان ينشأ الاضطراب من وجود موثر فيزيائي كحقل ضعيف او ما اشبه ، بل يمكن ان نعتبر حالة جملة ما حالة مضطربة بسبب وجود حد في موثر هاميلتون يجعل حلها مستحيلا ،ونعتبر الحالة الموافقة بعد حذف هذا الحد حالة غير مضطربة . يؤدي مثلا وجود الحد e^2/r_{12} الى عدم امكانية حل معادلة شرودنجر المتعلقة بذرة الهيليوم حلا تاما ، ولهذا نعتبر الحالات الموافقة لوجود هذا الحد حالات مضطربة . اما الحالات الموافقة لغيابه (وهي غير واقعية فيزيائيا) فيمكن حسابها تحليليا وحساب القيم الخاصة الموافقة. نعتبر هذه الحالات غير الواقعية فيزيائيا حالات غير مضطربة تنشأ عنها الحالات المضطربة باضافة الحد e^2/r_{12} الى موثرهاميلتون المبسط غير المضطرب .

§4. نظرية الاضطراب للحالات غير المتحللة

لنفرض ان الهاميلتوني المضطرب للجملة المدروسة معطى بالعلاقة

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} + \lambda \hat{V} \tag{4.1}$$

حيث ان λ عامل ضرب حقيقي صغير بما يكفي لكي يتمشى مع مناقشاتنا اللاحقة. نفرض ايضا ان $\hat{H}$ و $\hat{V}$ مستقلان عن الزمن وانهما هرميتيان ،وان التوابع الخاصة المتعلقة

بالجزء غير المضطرب $\hat{H}$ والقيم الخاصة المقابلة لها يمكن حسابها. بعبارة ثانية نفرض ان المعادلة الخاصة للهاميلتوني غير المضطرب

$$H\Psi = \varepsilon \Psi \tag{4.2}$$

يمكن حلها وان توابعها الخاصة في شكلها المتنامد هي

$$\Psi_0 , \Psi_1 , \Psi_2 , \ldots , \Psi_n , \ldots \tag{4.3}$$

كما نفرض ان القيم الخاصة المقابلة غير متحللة ونرمز لهذه القيم بالرموز

$$\varepsilon_0 , \varepsilon_1 , \varepsilon_2 , \ldots , \varepsilon_n , \ldots \tag{4.4}$$

ينشأ عن الاضطراب $\lambda\hat{V}$ انزياح سويات الطاقة (4.4) الى سويات مجاورة

$$E_0 , E_1 , E_2 , \ldots , E_n , \ldots \tag{4.5}$$

وانزياح التوابع الموجية (4.3) الى التوابع

$$\Psi'_0 , \Psi'_1 , \Psi'_2 , \ldots , \Psi'_n , \ldots \tag{4.6}$$

ان قيم الطاقة (4.5) والتوابع الموجية (4.6) هي على الترتيب القيم الخاصة الهاميلتوني $\hat{\mathcal{H}}$ وتوابعه الخاصة ، أى أن

$$\mathcal{H}\Psi'_n = E_n \Psi'_n \tag{4.7}$$

عندما نقول ان السويات الجديدة المضطربة E_n قريبة من المسويات الاصلية غير المضطربة ε_n وان التوابع الموجية المضطربة Ψ'_n قريبة من التوابع الموجية غير المضطربة Ψ_n فانما نعني بذلك انه يمكن ان ننشر E_n و Ψ'_n في سلسلتي قوى في λ.

$$E_n = \varepsilon_n + \lambda f_n + \lambda^2 g_n + \cdots \tag{4.8}$$

$$\Psi'_n = \Psi_n + \lambda \phi_n + \lambda^2 \chi_n + \cdots \tag{4.9}$$

وأن هاتين السلسلتين تتقاربان بسرعة من E_n و Ψ_n على الترتيب ، ولدرجة أنــه يكفي أخذ الحدود الأولى فقط في الاعتبار لنحصل على تقريب جيد لـ E_n و Ψ_n. ان مهمتنا الآن هي تعيين الاعداد f_n و g_n و ... في (4.8) وتعيين التوابــع ϕ_n و χ_n و ... في (4.9) وسوف نضع شرطا على هذه التوابع عما قريب .

لن نفترض ان Ψ_n مســتنظم ولكنا نعين ثابت الضرب الكيفي الذى يتضمنـــه بالعلاقة التالية :

$$\langle \psi_n | \Psi_n \rangle = 1 \tag{4.10}$$

لنعوض Ψ_n من (4.9) في العلاقة (4.10) فنجد

$$1 = \langle \psi_n | \psi_n + \lambda \phi_n + \lambda^2 \chi_n + \cdots \rangle$$

$$= 1 + \lambda \langle \psi_n | \phi_n \rangle + \lambda^2 \langle \phi_n | \chi_n \rangle + \cdots$$

ونرى أن هذه العلاقة تتحقق من أجل جميع قيم λ اذا وفقط اذا كان

$$\langle \psi_n | \phi_n \rangle = \langle \psi_n | \chi_n \rangle = \cdots = 0 \tag{4.11}$$

وبما ان Ψ_n شعاع خاص لمؤثر هاميلتون المضطرب $\hat{\mathcal{H}}$ يقابل القيمة الخاصـــة E_n ، فنجد بتعويض $\hat{\mathcal{H}}$ و E_n و Ψ_n من (4.1) و (4.8) و (4.9) فـــي (4.7) أن

$$(H + \lambda V)(\psi_n + \lambda \phi_n + \lambda^2 \chi_n + \cdots) = (\varepsilon_n + \lambda f_n + \lambda^2 g_n + \cdots)(\psi_n + \lambda \phi_n + \lambda^2 \chi_n + \cdots) \tag{4.12}$$

وبمطابقة امثال قوى λ المختلفة في طرفي العلاقة السابقة نجد

$$\hat{H} \psi_n = \varepsilon_n \psi_n \tag{4.13}$$

$$\hat{H} \phi_n + \hat{V} \psi_n = \varepsilon_n \phi_n + f_n \psi_n \tag{4.14}$$

$$\hat{H} \chi_n + \hat{V} \phi_n = \varepsilon_n \chi_n + f_n \phi_n + g_n \psi_n \tag{4.15}$$

التقريب من المرتبة الاولى :

نلاحظ اولا ان المعادلة (4.13) لا تعطي أية معلومات جديدة فهي ليست سوى (4.2). الآن وبضرب طرفي المعادلة (4.14) داخليا من اليسار بالشعاع Ψ_m نجد

$$\langle \Psi_m | H \phi_n \rangle + \langle \Psi_m | V \Psi_n \rangle = \varepsilon_n \langle \Psi_m | \phi_n \rangle + f_n \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle \quad (4.16)$$

ولكن $\hat{H}$ موئثر هرميتي، ولذلك نرى أن الحد الأول في الطرف الايسر من المعادلة الاخيرة يكتب كما يلي :

$$\langle \Psi_m | H \phi_n \rangle = \langle H \Psi_m | \phi_n \rangle = \langle \varepsilon_m \Psi_m | \phi_n \rangle = \varepsilon_m \langle \Psi_m | \phi_n \rangle \quad (4.17)$$

واستنادا الى هذا نكتب (4.16) على الصورة

$$\varepsilon_m \langle \Psi_m | \phi_n \rangle + \langle \Psi_m | V \Psi_n \rangle = \varepsilon_n \langle \Psi_m | \phi_n \rangle + f_n \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle \quad (4.18)$$

ونميز حالتين تبعا لقيمة m :

الحالة ($m \neq n$) : وتؤول العلاقة (4.18) بسبب تعامد التوابع الموجية الخاصة $\{\Psi_k\}$ للموئثر الهرميتي $\hat{H}$ الى الشكل

$$\varepsilon_m \langle \Psi_m | \phi_n \rangle + \langle \Psi_m | V \Psi_n \rangle = \varepsilon_n \langle \Psi_m | \phi_n \rangle \quad (4.19)$$

الذى نجد منه أن

$$\langle \Psi_m | \phi_n \rangle = \frac{\langle \Psi_m | V \Psi_n \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \quad (4.20)$$

تمثل الاعداد $\langle \psi_m | \phi_n \rangle$ من أجل $(m = 0, 1, 2, \ldots)$ عوامل أو امثال ψ_m في منشور ϕ_n بدلالة الاشعة الخاصة ψ_m لمؤثرهاميلتون غير المضطرب $\hat{H}$ (مركبات ϕ_n على ψ_m) .

$$\phi_n = \sum_{m=0}^{\infty} \langle \psi_m | \phi_n \rangle \psi_m \tag{4.21}$$

واما $\langle \psi_m | V \psi_n \rangle$ فهو العنصر ذو رقم السطر m والعمود n في المصفوفة $[V_{mn}]$ الممثلة للمؤثر الهرميتي $\hat{V}$. وبناء على هذا نكتب :

$$a_m = \langle \psi_m | \phi_n \rangle = \frac{V_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \tag{4.22}$$

الحالة $(m = n)$: في هذه الحالة يكون الجداء الداخلي $\langle \psi_m | \phi_n \rangle$ معدوما بحسب العلاقة (4.11) ، وهكذا تؤول (4.18) الى الشكل

$$V_{nn} = \langle \psi_n | V \psi_m \rangle = f_n \tag{4.23}$$

تعين العلاقة (4.23) التصحيح من المرتبة الأولى λf_n الواجب اضافته الى سوية الطاقة غير المضطربة ε_n للحصول على سوية الطاقة المضطربة E_n مقربة من المرتبة الأولى . تدل هذه العلاقة أيضا ان هذا التصحيح يساوي القيمة المتوقعة للحد المضطرب λV في الحالة غير المضطربة ψ_n . اما التصحيح من المرتبة الأولى لتابع الحالة غير المضطربة ψ_n $\lambda \phi_n$ فنحصل عليه من (4.22) و (4.21)

$$\phi_n = \sum{}' \frac{V_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \psi_m \tag{4.24}$$

وتعني الفتحة فوق اشارة المجموع ان الحد $m = n$ محذوف منه ، وبالفعل فنحن نعلم أن مركبة ϕ_n في اتجاه ψ_m معدومة بحسب (4.11) .

نلخص نتائجنا في هذا البند بقولنا انه بتقريب من المرتبة الأولى :

تكتب التوابع الموجية المضطربة Ψ_m للهاميلتوني المضطرب $\hat{\mathcal{H}}$ بالشكل

$$\Psi_n = \varphi_n + \lambda \sum_m^{\infty}{}' \frac{V_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \varphi_m \tag{4.27}$$

وتكتب سويات الطاقة المضطربة E_n بالشكل

$$E_n = \varepsilon_n + \lambda V_{nn} \tag{4.26}$$

وتدل العلاقة الاخيرة على أن سوية الطاقة المضطربة E_n تساوى مجموع الطاقة غير المضطربة ε_n والعنصر القطرى ذو الرقم n من المصفوفة $\lambda[V_{mn}]$ الممثلة للحد المضطرب $\lambda\hat{V}$. ونرى أن قيم الطاقة المضطربة الخاصة وتوابعها الخاصة يمكن كتابتها بحسب (4.25) و (4.26) بعد ان نكون قد كتبنا سلفا المصفوفة $\lambda[V_{mn}]$ الممثلة للحد المضطرب .

تمرين : برهن ان التوابع الخاصة المضطربة Ψ_n مستنظمة الى المرتبة الأولى في λ، بمعنى أن

$$\|\Psi_n\|^2 = \|\varphi_n\|^2 + O(\lambda^2) = 1 + O(\lambda^2)$$

(استفد من أن التابع φ_n والتابع المعطى بالحد الثاني في (4.25) والممثل بالمجموع الذى حذف منه φ_n متعامدان . يمكنك بالتالي تطبيق فيثاغورث للوصول الى النتيجة) .

التقريب من المرتبة الثانية :

تحسب حدود المرتبة الثانية في λ في (4.8) و (4.9) بدءا من العلاقة (4.15).بالحقيقة وبأخذ الجداء الداخلي لطرفي هذه العلاقة من اليسار بالتابع φ_m نجد

1) من أجل $m \neq n$

$$\varepsilon_m \langle \varphi_m | \chi_n \rangle + \langle \varphi_m | V \phi_n \rangle = \varepsilon_n \langle \varphi_m | \chi_n \rangle + f_n \langle \varphi_m | \phi_n \rangle \tag{4.27}$$

ولكن $b_m = \langle \psi_m | \chi_n \rangle$ هي عامل ψ_m في منشور χ_n بدلالة التوابع الخاصة لـ $\hat{H}$ وهي $\{\psi_k\}$

$$x_n = \sum_m \langle \psi_m | \chi_n \rangle \psi_m = \sum_m b_m \psi_m \tag{4.28}$$

وهكذا نجد من (4.27) أن.

$$b_m = \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \langle \psi_m | (V - f_n) \phi_n \rangle$$

$$= \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \sum_{j=0}^{\infty}{}' \frac{V_{jn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_j} \langle \psi_m | (V - f_n) \psi_j \rangle \quad \text{(بحسب (4.24))}$$

$$= \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \left[\sum_{j=0}^{\infty}{}' \frac{V_{jn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_j} V_{mj} - \sum_{j=0}^{\infty} \frac{V_{jn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_j} f_n \delta_{mj} \right]$$

$$= \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \left[\sum_{j=0}^{\infty}{}' \frac{V_{jn} V_{mj}}{\varepsilon_n - \varepsilon_j} - \frac{V_{mn} V_{nn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \right] \tag{4.29}$$

٢) من أجل $m = n$

$$\varepsilon_m \langle \psi_n | \chi_n \rangle + \langle \psi_n | V \phi_n \rangle = \varepsilon_n \langle \psi_n | \chi_n \rangle + f_n \langle \psi_n | \phi_n \rangle + g_n \tag{4.30}$$

وبالاستفادة من المعادلة (4.11) التي تدل على أن عامل ψ_n في منشور χ_n بدلالة $\{\psi_k\}$ معدوم، وان عاملة في منشور ϕ_n معدوم ايضا نجد أن

$$\langle \psi_n | V \phi_n \rangle = g_n \tag{4.31}$$

وبالتعويض من أجل ϕ_n من (4.24) في العلاقة الاخيرة نجد

$$\langle \psi_n | V \sum_m{}' \frac{V_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \psi_m \rangle = g_n$$

وباتباع سلسلة من عمليات الاصلاح نجد

$$g_n = \sum_m{}' \frac{V_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \langle \psi_n | V \psi_m \rangle$$

$$= \sum_m{}' \frac{V_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} V_{nm}$$

$$= \sum_m{}' \frac{V_{mn} V_{mn}^*}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \qquad (V \text{ هرميتي})$$

$$= \sum_m{}' \frac{|V_{mn}|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \tag{4.32}$$

يمكن حساب التصحيحات من مراتب اعلى اذا احتجنا اليها باتباع طريقة مماثلة لتلك التي سلكناها في حساب التصحيحات من المرتبة الأولى والثانية ، ولكن العمل يزداد مشقة باطراد .

§ 5 الهزاز البسيط اللاتوافقي :

يُعطى الهاميلتوني المتعلق بالهزاز البسيط اللاتوافقي ذي البعد الواحد بالعلاقة

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \lambda x^4 \tag{5.1}$$

حيث λ عدد حقيقي صغير.يتألف الهاميلتوني غير المضطرب هنا من الحد الأول والثاني. واما الحد المضطرب فهو الحد الثالث $\lambda V = \lambda x^4$ الذى نعتبره صغيرا بالمقارنة مع الهاميلتوني غير المضطرب $\hat{H}$

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad , \quad \lambda V = \lambda x^4 \tag{5.2}$$

كان قد تم حساب طاقة الحالة الدنيا غير المضطربة في بحث الهزاز التوافقي ووجدنا ان $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ وان تابع الحالة الموافق

$$(5.3) \qquad \psi_0 = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2} \qquad \beta = \sqrt{m\omega/\hbar}$$

اذن فالتصحيح الواجب اضافته الى طاقة الحالة الدنيا غير المضطربة ε_0 هو

$$(5.4) \qquad \langle \lambda x^4 \rangle_{\psi_0} = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/2} \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-\beta^2 x^2} dx$$

$$= \frac{3\lambda}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2$$

تساوى اذن الطاقة الدنيا للهزاز اللاتوافقي

$$(5.5) \qquad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega\left[1 + \frac{3\lambda}{2}\left(\frac{\hbar}{m^2\omega^3}\right)\right]$$

يمكن الحصول ايضا على النتيجة الاخيرة بالاعتماد على (4.26) لنجد

$$(5.6) \qquad E_0 = \varepsilon_0 + \lambda V_{00} = \varepsilon_0 + \lambda x^4_{00}$$

وبالاستفادة من المصفوفة التي تمثل x^4 والمعطاة بالعلاقة (VII . 9.2) نجد

$$(5.7) \qquad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega + \lambda \frac{3\hbar^2}{4m^2\omega^2}$$

تمرين : برهن بالاعتماد على المصفوفة $[x^4]$ المعطاة بالعلاقة (VII . 9.2) أن الطاقات المضطربة E_1 و E_2 تعطى بالعلاقات

$$(5.8) \qquad E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega + \lambda\frac{15\hbar^2}{4m^2\omega^2} \quad , \quad E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega + \lambda\frac{27\hbar^2}{4m^2\omega^2}$$

للحصول على سويات الطاقة المضطربة العليا يجب ان نحسب المصفوفة $[x^4]$ حسابا تاما . بالاستفادة من الشكل (VII . 4.2) المستعمد المستنظم للتوابع الخاصة

لـلهزاز التوافقي البسيط نجد أن

$$(5.9) \qquad x^4_{mn} = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} 2^{-\frac{1}{2}(m+n)} (m!\,n!)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 H_m(\beta x) H_n(\beta x) e^{-\beta^2 x^2} dx$$

بالعودة الى المتحول y المعرف بالعلاقة $x = y/\beta$ نجد أن

$$(5.10) \qquad x^4_{mn} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \beta^{-4} 2^{-\frac{1}{2}(m+n)} (m!\,n!)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 e^{-y^2} H_m(y)\, H_n(y)\, dy$$

وبالاستفادة من علاقة التدرج (VII . A . 17) نجد أن

$$(5.11) \qquad \begin{aligned} y^2 H_m &= \tfrac{1}{2} y (H_{m+1} + 2m\, H_{m-1}) \\ &= \tfrac{1}{4}\{ H_{m+2} + 2(m+1)\, H_m + 2m [H_m + 2(m-1)\, H_{m-1}]\} \\ &= \tfrac{1}{4} H_{m+2} + \tfrac{1}{2}(2m+1)\, H_m + m(m-1)\, H_{m-2} \end{aligned}$$

ويمكن الان التعبير عن التكامل في المعادلة (5.10) على شكل تكاملات من الشكل (VII . A . 23). بالفعل ان

$$(5.12) \qquad \begin{aligned} y^4 H_m H_n = &\{ \tfrac{1}{4} H_{m+2} + \tfrac{1}{2}(2m+1)\, H_m + m(m-1)\, H_{m-2}\} \times \\ &\{ \tfrac{1}{4} H_{m+2} + \tfrac{1}{2}(2n+1)\, H_n + n(n-1)\, H_{n-2}\} \end{aligned}$$

ومن أصل الجداءات التسعة الناتجة نرى أنه من أجل $m = n$ توجد ثلاثة حدود تسهم في التكامل وهي

$$(5.13) \qquad \frac{1}{16} H^2_{m+2} \;,\; \frac{1}{4}(2m+1)^2 H^2_m \;,\; m^2 (m-1)^2 H^2_{m-2}$$

وتكون نتيجة التكامل من أجل $m = n$

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2^m . m!} \left\{ \frac{1}{16} 2^{m+2} (m+2)! + \frac{1}{4} 2^m m! (2m+1)^2 + m^2 (m-1)^2 2^{m-2} (m-2)! \right\}$$
$$= \frac{3}{4} (2m^2 + 2m + 1) \sqrt{\pi}$$

وبناء عليه يكون

$$x^4_{mm} = \frac{3}{4}\beta^{-4}\,(2m^2+2m+1) \qquad (5.14)$$

ونرى ايضا انه يوجد جداء ان يسهمان في التكامل من أجل $m+2=n$ وجداءان من أجل $n+2=m$ وجداء واحد من أجل $m=n-4$ وواحد من أجل $n=m-4$.

ونلخص نتائجنا بما يلي :

$$V_{mm} = \frac{3}{4}\beta^{-4}\,(2m^2+2m+1)$$

$$V_{m,m+2} = \frac{1}{2}\beta^{-4}\left[(m+1)(m+2)\right]^{1/2}(2m+3) \qquad = V_{m+2,m}$$

$$V_{m,m+4} = \frac{1}{4}\beta^{-4}\left[(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)\right]^{1/2} \qquad = V_{m+4,m} \qquad (5.15)$$

$$V_{m,m-2} = \frac{1}{2}\beta^{-4}\left[m(m-1)\right]^{1/2}\,(2m-1) \qquad = V_{m-2,m}$$

$$V_{m,m-4} = \frac{1}{4}\beta^{-4}\left[m(m-1)(m-2)(m-3)\right]^{1/2} = V_{m-4,m}$$

أما العناصر المتبقية فهي معدومة .

بالتعويض في (4.26) و (4.25) نجد أن قيم الطاقة المضطربة محسوبة للمرتبة الاولى في λ

$$E_n = \hbar\omega(n+\tfrac{1}{2}) + \frac{3}{4}\lambda\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2(2n^2+2n+1) \qquad (5.1\ \ )$$

وان التوابع الخاصة المضطربة المقابلة لها هي :

$$\Psi_n = \psi_n + \frac{\lambda}{\omega\hbar}\Big(\frac{1}{4}V_{n-4,n}\,\psi_{n-4} + \frac{1}{2}V_{n-2,n}\,\psi_{n-2} - \frac{1}{2}V_{n+2,n}\,\psi_{n+2} - \frac{1}{4}V_{n+4,n}\,\psi_{n+4}\Big) \qquad (5.1\ \ )$$

تمرين : لنعتبر الهزاز اللاتوافقي

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \mu x^3 + \lambda x^4$$

حيث μ و λ صغيرتان . بين ان المصفوفة الممثلة ل x^3 لها العناصر

$$x^3_{n-3,n} = x^3_{n,n-3} = \beta^{-3}\left[\frac{1}{8} n(n-1)(n-2)\right]$$

$$x^3_{n-1,n} = x^3_{n,n-1} = \beta^{-3}\sqrt{9n^3/8}\,.$$

بين ان التصحيح في التقريب الأول والناتج عن μx^3 معدوم .

بين ان التصحيح في التقريب الثاني والناتج عن μx^3 هو من مرتبة التقريب الأول الناتج عن λx^4 .

بين ان الطاقة التقريبية للهزاز التوافقي (5.18) هي

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{15}{4}\frac{\mu^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right)$$
$$+\frac{3}{2}\lambda\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right).$$

٦. نظرية الاضطراب في الحالة المتحللة :

اذا كانت الجملة غير المضطربة متحللة بالنسبة لطاقتها فانا نلحق بالطاقة ملحوظات اخرى تتعلق بالجملة لكي نحصل على مجموعة ملحوظات كاملة .[1] وعندئذ نرمز ب $\{\psi_i\}$ الى جملة الاشعة الكاملة المستندة لمجموعة الملحوظات الكاملة كما نرمز ب ε_i الى قيم الطاقة الخاصة المقابلة وهي ليست جميعا متمايزة .

لنفرض ان الجملة غير المضطربة كانت متحللة من المرتبة s بالنسبة الى قيمة خاصة معينة للطاقة ولتكن ε . سوف نأخذ جملة متعامدة من s شعاعا تقابل ε مرقمة بالشكل ψ_1 ، ψ_2 ، ... ، ψ_s . عند ما يطبق الاضطراب على الجملة ، تتأثر الـ s حالة هذه باشكال مختلفة ، وسوف نفترض ان السوية المتحللة ε تنقسم الى s سوية مضطربة متمايزة E_1 و E_2 و ... و E_s ، حيث ان

$$E_i = \varepsilon + \lambda f_i + \lambda^2 g_i + \cdots \qquad (i = 1, 2, \ldots, s) \tag{6.1}$$

وتقابل هذه السويات توابع الحالات المضطربة

$$\Psi_i = \psi_i + \lambda \phi_i + \lambda^2 g_i + \cdots \qquad (i = 1, 2, \ldots, s) \tag{6.2}$$

بتطبيق المحاكمة التي مرت معنا في الحالة غير المتحللة نحصل على العلاقة (4.19) مكتوبة بالشكل

$$\langle \psi_i | V \psi_j \rangle = (\varepsilon_j - \varepsilon_i) \langle \psi_i | \phi_j \rangle \tag{6.3}$$

وذلك من أجل $i \neq j$. اذا كان $i, j \leq s$ كان $\varepsilon_i = \varepsilon_j$ وعندئذ يكون

$$V_{ij} = \langle \psi_i | V \psi_j \rangle = 0 \tag{6.4}$$

اى ان كافة عناصر المصفوفة الجزئية $K = [V_{ij} \mid i, j \leq s]$ غير القطرية يجب أن تكون معدومة وبناء على هذا نجد أن محاكمتنا تكون صالحة فقط اذا كانت المصفوفة

الجزئية K قطرية .

ليس من الضروري ان يقود الاختيار $\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_s\}$ للاشعة الخاصة ل $\hat{H}$ والمقابلة ε الى تمثيل V بمصفوفة تكون فيها المصفوفة الجزئية K قطرية. تولد مجموعة الاشعة $S = \{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_s\}$ فراغا شعاعيا جزئيا $Lin\, S$ ويكون كل شعاع فيه تابع خاص ل $\hat{H}$ يقابل ε . تتلخص مهمتنا الآن في اختيار اشعة مستندة ψ_1' و ψ_2' و ... و ψ_n' من $Lin\, S$ حيث تُمثَّل V فيها بمصفوفة $[V_{ij}']$ تكون فيها المصفوفة الجزئية $K' = [V_{ij}' | i,j \le s]$ قطرية . يبرهن في الجبر أنه يوجد دوما تحويل واحدي $\hat{U}$ على الفراغ الشعاعي الجزئي $Lin\, S$ من فراغ التوابع الموجية :

$$\psi' = U\psi \; , \; K' = UKU^{-1} \tag{6.5}$$

حيث تصبح المصفوفة K' قطرية . لن نسير في ايجاد هذا التحويل الواحدى لانه لن يلزمنا ولكنا نلاحظ أنه اذا ما تم تمثيل $\hat{V}$ بعد هذا التحويل بمصفوفة $[V_{ij}']$ تكون فيها المصفوفة الجزئية K' ، المؤلفة من الاعمدة والاسطر s الاولى قطرية فان عناصر قطرها ستكون بحسب (3.23) مساوية الى التصحيحات من المرتبة الاولى f_1 و f_2 و ... و f_s على الترتيب .

لنعتبر المعادلة المميزة لجذور المصفوفة القطرية K' وهي

$$|K' - \rho I| = 0 \tag{6.6}$$

ويمكن ان نكتب هذه بالشكل

$$(f_1 - \rho)(f_2 - \rho) \cdots (f_s - \rho) = 0 \tag{6.7}$$

وينتج من هذه المعادلة أن f_1 و f_2 و ... و f_s هي الجذور المميزة. ولكن

$$|K' - \rho I| = |UKU^{-1} - \rho UU^{-1}|$$

$$= |U(K-\rho I)U^{-1}|$$

$$= |U|\,|K-\rho I|\,|U^{-1}|$$

$$= |U|\,|U|^{-1}\,|K-\rho I|$$

$$= |K-\rho I|$$

وذلك لأن $|U| = 1$. وبناء على هذا فان المعادلة (6.8) تكافىء المعادلة المميزة للجذور المميزة للمصفوفة K التي بدأنا بها :

$$|K-\rho I| = 0 \qquad (6.9)$$

وبناء على هذا ولكي نحسب قيم ρ_i يكفي ان نعين الجذور المميزة للمصفوفة الممثلة لموئثر الاضطراب $\hat{V}$ مكتوبة بالنسبة لأية جملة كاملة .

§ 7. مفعول ستارك

ندرس هنا اثر تطبيق حقل كهربائي منتظم على ذرة شبه هيدروجينية . وسوف نلجأ الى نظرية الاضطراب لتعيين السويات الجزئية التي تنقسم اليها السوية المتحللة الاصلية . تتألف جملتنا غير المضطربة هنا من الكترون وحيد شحنته $-e$ يتحرك في حقل قوى كولوني ، ويكون موئثرها ميلتون المتعلق بها

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \qquad (7.1)$$

نفرض أن شدة الحقل الكهربائي المسبب الاضطراب منتظمة وتساوى F وتتجه باتجاه المحور z ، وبناء على هذا يكون الحد المضطرب λV معطى بالعلاقة

$$\lambda V = -\int_0^z -eF\,dz = eFz = eFr\cos\theta \qquad (7.2)$$

نعتبر في هذه الحالة

$$\lambda = eF \quad , V = r\cos\theta \tag{7.3}$$

ان الجملة غير المضطربة متحللة بالنسبة للطاقة ، وبالفعل توجد n^2 حالة (نهمل السبين) $\Psi_{n\ell m}$ تقابل جميعا الطاقة ε_n نفسها . تؤلف التوابع $\Psi_{n\ell m}$ جملة كاملة من الاشعة الخاصة ، وتكون عناصر المصفوفة الجزئية من [٧] والمقابلة للسوية المتحللة $\varepsilon = \varepsilon_n$ معطاة بالعلاقة

$$V_{n\ell'm',n\ell m} = \langle \Psi_{n\ell'm'} | r\cos\theta | \Psi_{n\ell m} \rangle \tag{7.4}$$

وبالتعويض من أجل Ψ نجد :

$$V_{n\ell'm',n\ell m} = \int_0^\infty r^3 R_{n\ell'} R_{n\ell}\, dr \times \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi Y^*_{\ell'm'} Y_{\ell m} \sin\theta\cos\theta\, d\theta \tag{7.5}$$

لكن

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi Y^*_{\ell'm'} Y_{\ell m} \sin\theta\cos\theta\, d\theta$$

$$= A_{\ell'm'} A_{\ell m} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi}\, d\phi \times \int_0^\pi P_{\ell'}^{m'} P_\ell^m \sin\theta\cos\theta\, d\theta$$

$$= 2\pi\,\delta_{mm'} A_{\ell m} A_{\ell' m} \int_0^\pi P_{\ell'}^m P_\ell^m \sin\theta\cos\theta\, d\theta \tag{7.6}$$

حيث ان $A_{\ell m}$ معطاة بالعلاقة

$$A_{\ell m} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} \tag{7.7}$$

وبوضع $\cos\theta = \mu$ في التكامل الاخير نجد أن

$$\int_0^{\pi} P_{\ell'}^{m} P_{\ell}^{m} \sin\theta \cos\theta \, d\theta = \int_{-1}^{+1} P_{\ell'}^{m} \; P_{\ell}^{m}(\mu) \, \mu \, d\mu$$

ولقد تم حساب هذا التكامل في (VIII .(A.27)) . وبالاستفادة من نتيجة الحساب نجد أن

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} Y_{\ell' m'}^{*} \, Y_{\ell m} \sin\theta \cos\theta \, d\theta \tag{7.8}$$

$$= \begin{cases} \left(\dfrac{\ell^2 - m^2}{4\ell^2 - 1}\right)^{1/2} \delta_{mm'} & \text{if } \ell = \ell' + 1 \quad (7.8a) \\[2ex] \left(\dfrac{\ell'^2 - m^2}{4\ell'^2 - 1}\right)^{1/2} \delta_{mm'} & \text{if } \ell' = \ell + 1 . \quad (7.8b) \end{cases}$$

ويساوى صفرا فيما عدا ذلك.لنفرض الآن أن $\ell = \ell' + 1$ فيكون

$$\int_0^{\infty} r^3 R_{n\ell} R_{n\ell'} \, dr = \frac{\pi \epsilon_0 \hbar^2}{m_e Z e^2} \cdot \frac{(n-\ell-1)!}{\{(n+\ell)!\}^3} \{(n-\ell)(n+\ell)^3\}^{1/2} \times \int_0^{\infty} e^{-x} x^{2\ell+2} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} L_{n-\ell}^{2\ell-1} \, dx \tag{7.9}$$

حيث استفدنا من العلاقة (IX .(2.29)) بين x و r . لقد تم حساب التكامل الاخير في (IX .(A.41)) .

وبالاستفادة من نتيجة المكاملة نجد

$$\int_0^{\infty} r^3 R_{n\ell} R_{n\ell'} \, dr = -\frac{6\pi \epsilon_0 \hbar^2}{m_e Z e^2} \, n\sqrt{n^2 - \ell^2} \tag{7.10}$$

وبالاستفادة من المعادلة (7.5) واذا كان $\ell = \ell' + 1$ و $m = m'$ فان

(7.11) $$V_{n\ell'm',n\ell m} = -\frac{6\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e Z e^2}\, n \left\{ \frac{(\ell^2-m^2)(n^2-\ell^2)}{4\ell^2-1} \right\}^{1/2}$$

واذا كان $\ell' = \ell + 1$ و $m' = m$ فان

(7.12) $$V_{n\ell'm',n\ell m} = -\frac{6\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e Z e^2} \left\{ \frac{(\ell'^2-m^2)(n^2-\ell'^2)}{4\ell'^2-1} \right\}^{1/2}$$

وتنعدم كافة عناصر المصفوفة الجزئية $K_n = [V_n]$ الاخرى .

لنحسب مثلا المصفوفة الجزئية $[V_2]$ المقابلة ل $n = 2$ من العلاقتين (7.11) و (7.12) نجد :

(7.13) $$V_{210,200} = -\frac{6\pi\epsilon_0\hbar^2 n}{m_e Z e^2} = V_{200,210}$$

اما باقي العناصر فهي معدومة بحسب (7.8a) و (7.8b) ولذلك يكون

(7.14) $$[V_2] = -\frac{6\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e Z e^2}\cdot 2 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

ونكتب المعادلة المميزة للمصفوفة الاخيرة :

(7.15) $$\begin{vmatrix} -\rho & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\rho & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -\rho & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\rho \end{vmatrix} = 0 \;\longrightarrow\; \rho^4 - \rho^2 = 0$$

وتكون الجذور المميزة

$$p_1 = -1 \quad , \; p_2 = 0 \quad , \; p_3 = +1 \qquad (7.16)$$

اى أن p يأخذ كافة القيم من $(n-1)$ - الى $(n-1)$ ، وتكون قيم الطاقة المضطربة الناتجة عن السوية المتحللة E_2 هي

$$E_{2p} = \varepsilon_2 + 2\,\frac{6\pi\epsilon_0 \hbar^2 p F}{m_e Z e} \qquad (7.17)$$

حيث تأخذ p القيمة الصحيحة من -1 الى $+1$.

من أجل سوية طاقة متحللة غير مضطربة ε_n ، وهي كما نعلم متحللة من المرتبة n^2 ، نجد ان هذه السوية تنقسم بسبب تفاعل الجملة والحقل الكهربائي الى $(2n-1)$ سويةمتمايزة

$$E_{np} = \varepsilon_n + n\,\frac{6\pi\epsilon_0 \hbar^2 p F}{m_e Z e} \qquad (7.18)$$

حيث تأخذ p كافة القيم الصحيحة من $(n-1)$- الى $(n-1)$.

لا يوئثر اعتبار السبين (اذا ما اهمل التفاعل السبيني المدارى) على انقسام السوية ε_n، بل تبقى العلاقة (7.18) قائمة وبالفعل واذا اعتبرنا التابع الموجي الذى يأخذ السبين بالحسبان $\Psi = \psi_{n\ell m m_s}$ لكان

$$V_{n\ell' m' m_s', n\ell m m_s} = \int \psi^{+}_{n\ell' m' m_s'}\, r\cos\theta\, \psi_{n\ell m m_s}\, d\tau$$

$$= \delta_{m_s m_s'} \int \psi^{*}_{n\ell' m'}\, r\cos\theta\, \psi_{n\ell m}\, d\tau$$

اذا كان $\ell = \ell' + 1$ و $m = m'$ و $m_s = m_s'$ فان نتيجة التكامل هي (7.11) ،
واذا كان $\ell' = \ell + 1$ و $m' = m$ و $m_s' = m_s$ فان نتيجة التكامل هي (7.12) .

§ 8 . طريقة التغيير :

لتكن لدينا جملة مؤلفة من جسيم او عدة جسيمات ولنفرض ان لمؤثر هاميلتون المتعلق بها طيفا منقطعا $\{E_i\}$ يوافق الجملة الكاملة المستندة $\{\psi_i\}$ المؤلفة من التوابع الخاصة لـ $\hat{H}$. تساوى القيمة المتوقعة لـ $\hat{H}$ في الحالة الخاصة ψ_i القيمة الخاصة المقابلة E_i . ليكن φ تابعا موجيا مستنظما ولنرمز الى القيمة المتوقعة لـ $\hat{H}$ في الحالة φ بالرمز E ، أى أن

$$\langle H \rangle_\varphi = \langle \varphi | H | \varphi \rangle = E \qquad (8.1)$$

بما أن القيم الخاصة للطاقة هي اكبر او تساوى طاقة الحالة الدنيا E_1، لذلك تكون القيمة المتوقعة للطاقة في أية حالة للجملة اكبر او تساوى الطاقة الدنيا E_1 . وبصورة رمزية

$$E \geq E_1 \quad or \quad \langle H \rangle_\varphi \geq \langle H \rangle_1 \quad \forall \varphi . \qquad (8.2)$$

تؤلف الافادة الاخيرة المبدأ الذى ترتكز عليه طريقة التغيير .

تمرين : برهن على صحة العلاقة (8.2)

برهان : ننشر φ بدلالة عناصر الجملة الكاملة $\{\psi_i\}$ فيكون $\varphi = \sum \alpha_i \psi_i$، ويكون

$$E = \langle H \rangle_\varphi = \langle \sum_i \alpha_i \psi_i | H | \sum_j \alpha_j \psi_j \rangle$$

$$= \sum_{i,j} \alpha_i^* \alpha_j \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$$

$$= \sum_{i,j} \alpha_i^* \alpha_j E_j \delta_{ij}$$

$$= \sum_i |\alpha_i|^2 E_i$$

بطرح E_1 من الطرفين نجد

$$E - E_1 = \left(\sum_i |\alpha_i|^2 E_i \right) - E_1 = \sum_i |\alpha_i|^2 (E_i - E_1)$$

وبما ان الحدود $(E_i - E_1)$ موجبة جميعا لأنّ E_1 طاقة الحالة الدنيا، نجد أن $E \geqslant E_1$.

تتحقق المساواة اذا انعدم الطرف الثاني ، أي اذا انعدمت كل الامثال α_i باستثناء α_1 . عندئذ يكون $\varphi = \varphi_1$ وهو تابع الحالة الدنيا .

تستخدم طريقة ريتز في التغيير لمعرفة قيم تقريبية لطاقة الحالة الدنيا وللتابع الموجي الموافق لها . نختار φ بصورة تجريبية يكون فيها قريبا قدر المستطاع من تابع الحالة الدنيا φ_1 ، هذا ويترك في φ عدة وسطاء σ_1 و σ_2 و ... و σ_n وتحسب القيمة المتوقعة كتابع في هذه الوسطاء

$$E(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n) = \langle \varphi | H | \varphi \rangle$$

تعين هذه الوسطاء بعدئذ بصورة تصبح فيها E في قيمتها الدنيا ، أي تؤخذ هذه الوسطاء حلولا آنية لجملة المعادلات

$$\frac{\partial E}{\partial \sigma_1} = \frac{\partial E}{\partial \sigma_2} = \cdots = \frac{\partial E}{\partial \sigma_n} = 0 \qquad (8.4)$$

كتطبيق على طريقة التغيير ، نعتبر الهزاز البسيط التوافقي ونتجاهل اننا نعلم تابع حالته الدنيا. ولكن نتوقع ان يكون تابع الحالة الدنيا متناظرا حول المبدأ والا تكون له اية عقدة ، وكأي تابع موجي يجب ان يسعى الى الصفر عند اللانهاية. يحقق التابع

$$\varphi = e^{-\sigma x^2} \qquad \sigma > 0 \qquad (8.5)$$

هذه الشروط. اما نظيم φ فيحسب بسهولة

$$\|\varphi\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\sigma x^2} dx = \sqrt{\pi/2\sigma}$$

ولدينا ايضا

$$H\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(e^{-\sigma x^2}\right)'' + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 e^{-\sigma x^2}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left(4\sigma^2 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\right)x^2 - 2\sigma\right\} e^{-\sigma x}$$

ومن ثم يكون

$$(8.7) \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* H\varphi\, dx = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{4\sigma}\left(4\sigma^2 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\right) - 2\sigma\right]\sqrt{\frac{\pi}{2\sigma}}$$

وقد حسبنا في العبارة السابقة التكامل

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2\sigma x^2} dx = \frac{1}{2\sigma\sqrt{2\sigma}}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{4\sigma}\sqrt{\frac{4}{2\sigma}}$$

ومن العلاقتين (8.6) و (8.7) تكون القيمة المتوقعة لـ $\hat{H}$ في الحالة $\varphi(x,\sigma)$.

$$(8.8) \qquad E(\sigma) = \frac{\langle\varphi|H|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle} = \frac{\hbar^2\sigma}{2m} + \frac{m\omega^2}{8\sigma}$$

تأخذ $E(\sigma)$ نهايتها الصغرى عندما يكون

$$\frac{dE}{d\sigma} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8\sigma^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad \sigma = m\omega/2\hbar$$

بتعويض هذه القيمة لـ σ في (8.8) نجد أن طاقة الحالة الدنيا للهزاز هي

$\frac{1}{2}\hbar\omega$ ، وبتعويضها في التابع التجريبي (8.5) نجد الحالة الدنيا الموافقة.

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

ان كلتا النتيجتين معلومة لدينا من بحث الهزاز التوافقي .

9 § طرق التقريب مطبقة على ذرة الهيليوم

نكتب هاميلتوني ذرة الهيليوم على الشكل

$$\hat{\mathcal{H}} = H + \lambda V \tag{9.1}$$

حيث إن

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_2}\ ,\ \lambda V = e^2/r_{12}$$

لقد وجدنا من قبل حلول المعادلة $H\psi = E\psi$ وكان تابع الحالة الدنيا غير المضطربة معطى بالعلاقة (2.15) يُعيّن الشكل المستنظم لهذا التابع الآن بالعلاقة

$$I = c^2 \int_0^\infty e^{-2Z(r_1+r_2)/a_0}\, d\tau_1\, d\tau_2 \tag{9.3}$$

حيث إن

$$d\tau_1 = dx_1 dy_1 dz_1 = 4\pi r_1^2 dr_1$$
$$d\tau_2 = dx_2 dy_2 dz_2 = 4\pi r_2^2 dr_2 \tag{9.4}$$

ويكون الشكل المستنظم لتابع الحالة الدنيا

$$\psi_+ = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a_0} \tag{9.5}$$

اما التصحيح الاول للطاقة الدنيا فهو القيمة المتوقعة للحد المضطرب في الحالة غير المضطربة ψ_+

$$\Delta E = \left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle_{\psi_+} = \frac{Z^6 e^2}{\pi^2 a_0^6} \int_0^\infty e^{-2Z(r_1+r_2)/a_0} \frac{1}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 \qquad (9.6)$$

يتم حساب هذا التكامل في § B والنتيجة هي $5\pi^2 a_0^5/8Z^5$ ، وبذلك يكون

$$\Delta E = \frac{Z^6 e^2}{\pi^2 a_0^6} \times \frac{5\pi^2 a_0^5}{8Z^5} = \frac{5}{8}\frac{e^2 Z}{a_0}$$

$$= \frac{5}{2} \times 13.6 = 34 \text{ eV}$$

وذلك بملاحظة ان $e^2/2a_0$ هي الطاقة الدنيا لذرة الهيدروجين (في الجملة السغثية) .

من العلاقتين (2.14) و (9.7) نجد أن طاقة الحالة المضطربة الدنيا لذرة الهيليوم

$$E_{11} = -108.8 + 34 = -74.8 \text{ eV}$$

ولكن طاقة تشرد ذرة الهيليوم كما تعطيها التجربة هي 24.46 eV ، وبذلك تكون طاقة الحالة الدنيا لها

$$E_{11\,obs} = -54.4 - 24.5 = -78.9 \text{ eV} \qquad (9.9)$$

نطبق الآن طريقة التغيير لحساب الطاقة الدنيا لذرة الهيليوم ويمكننا البدء من تابع موجي تجريبي مستنظم من الشكل

$$\varphi = \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha(r_1+r_2)} \qquad (9.10)$$

ويكافىء هذا القول بأننا قد بدلنا Z في (9.5) بشحنة نووية فعالة $Z_{eff}=Z-\sigma$، وهو فرض معقول فيزيائيا، اذ ان كل الكترون يُحجَب جزئيا من رؤية الشحنة النووية الكلية بسبب وجود الالكترون الآخر. فاذا تركنا σ كيفية يمكن حساب القيمة المتوقعة للطاقة

$$E(\sigma) = \langle \mathcal{H} \rangle_{\varphi} \tag{9.11}$$

حيث $\mathcal{H}$ الهاميلتوني الكلي لذرة الهيليوم بما فيه التفاعل بين الالكترونين. وبحسب طريقة التغيير يجب ان يكون $E(\sigma) \gtrless E_{11}$ من أجل أية قيمة لـ σ. ونحصل على افضل تقدير لطاقة الحالة الدنيا بجعل $E(\sigma)$ في نهايته الدنيا بالنسبة الى σ وذلك من أجل

$$\varphi = \frac{(Z-\sigma)^3}{\pi a_0^3} e^{-(Z-\sigma)(r_1+r_2)/a_0} \tag{9.12}$$

بحساب (9.11) نجد أن :

$$E(\sigma) = -\frac{e^2}{a_0}\left(Z^2 - \frac{5}{8}Z + \frac{5}{8}\sigma - \sigma^2\right) \tag{9.13}$$

تمرين : برهن على صحة العلاقة الاخيرة.

تقع النهاية الصفرى لـ $E(\sigma)$ من أجل $\sigma = 15/16$ وتكون عندها

$$E(\sigma) = -\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2 \frac{e^2}{a_0} \tag{9.14}$$

ومن أجل $Z=2$ نحصل على الطاقة الدنيا لذرة الهيليوم

$$E_{11\,cal} = -\frac{729}{256}\frac{e^2}{a_0} = -\frac{729}{128} \times 13.6 = -77.46 \text{ eV} \tag{9.15}$$

وهي قريبة من القيمة المقيسة -78.86 . لقد تم اختيار توابع تجريبية φ تحــوى عدة وسطاء ، وكانت النتيجة المحسوبة مرضية جدا .

تمرين : بيّن انه اذا اختير الهاميلتوني غير المضطرب بالشكل

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{(Z-5/16)e^2}{r_1} - \frac{(Z-5/16)e^2}{r_2} \tag{9.16}$$

فان التصحيح الأول للطاقة الدنيا للهيليوم يكون معدوما .

§ A. حول توابع أولر :

يعرف تابع غاما بالتكامل

$$\Gamma(n) = \int_0^\infty u^{n-1} e^{-u}\, du \qquad n > 0 \tag{A.1}$$

يمكن البرهان بسهولة على أن :

$$\Gamma(1) = 1 \quad , \quad \Gamma(\tfrac{1}{2}) = \sqrt{\pi} \quad , \quad \Gamma(n+1) = n\,\Gamma(n)$$

اذا كان n عددا صحيحا موجبا فان :

$$\Gamma(n+1) = n(n-1)\cdots 2\cdot\Gamma(1) = n!$$

واذا كان n عدد موجبا نصف صحيح فان :

$$\Gamma(n+1) = n(n-1)\cdots \cdot\tfrac{3}{2}\cdot\tfrac{1}{2}\cdot\Gamma(\tfrac{1}{2})$$

$$= n(n-1)\cdots \cdot\tfrac{3}{2}\cdot\tfrac{1}{2}\cdot\sqrt{\pi}$$

ثمة تكاملات في الفصل الماضي يؤول حسابها الى حساب تكامل من الشكل

$$I = \int_0^\infty x^n e^{-\alpha^2 x^2} dx \qquad n \in \mathbb{N}$$

ومن المفيد ان نعطي علاقة للاستعمال المباشر في حساب ناتج تكاملات من الشكل السابق . باجراء تغيير في المتحول $u = \alpha^2 x^2$ يؤول التكامل السابق الى تابع غاما

$$I = \frac{1}{2} \alpha^{-(n+1)} \int_0^\infty u^{\frac{1}{2}(n-1)} e^{-u} du$$

$$= \frac{1}{2} \alpha^{-(n+1)} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)$$

اذا كان p عددا صحيحا موجبا فان

$$I = \frac{1}{2} \alpha^{-(n+1)} \begin{cases} p! & \text{if } n = 2p+1 \\ (p-\frac{1}{2})\cdot(p-\frac{3}{2})\cdot \ldots \cdot \frac{1}{2}\cdot\sqrt{\pi} & \text{if } n = 2p \end{cases}$$

يعرف تابع بيتا بالتكامل

$$B(m,n) = \int_0^1 u^{m-1} (1-u)^{n-1} du \qquad m,n > 0$$

يمكن البرهان على أن تابع بيتا يرتبط بتابع غاما بالعلاقة

$$B(m,n) = \Gamma(m)\Gamma(n) / \Gamma(m+n)$$

بوضع $u = \sin^2\theta$ في (A.2) نجد :

$$B(m,n) = 2\int_0^{\pi/2} \sin^{2m-1}\theta \cos^{2n-1}\theta \, d\theta \qquad (A.2)$$

بوضع $2n-1=0$ و $2m-1=0$ في العلاقة الاخيرة نجد :

$$\int_0^{\pi/2} \sin^p\theta \, d\theta = \frac{1}{2} B\left(\frac{p+1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{p+1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)/\Gamma\left(\frac{p+2}{2}\right) \tag{A.3}$$

$$= \begin{cases} \dfrac{1.3.5. \;\ldots\; .(2\ell-1)}{2.4.6. \;\ldots\; . \;2\ell} & \text{if } p=2\ell \\[2ex] \dfrac{2.4.6. \;\ldots\; . \;2\ell}{1.3.5. \;\ldots\; .(2\ell+1)} & \text{if } p=2\ell+1 \end{cases}$$

وبتبديل $(\frac{\pi}{2}-\theta)$ ب θ في $(A.3)$ نجد أن :

$$\int_0^{\pi/2} \cos^p\theta \, d\theta = \int_0^{\pi/2} \sin^p\theta \, d\theta$$

§ B . حساب القيمة المتوقعة للحد المضطرب في ذرة الهيليوم

يؤول حساب القيمة المتوقعة للحد المضطرب e^2/r_{12} في الحالة غير المضطربة الدنيا الى حساب التكامل الوارد في العلاقة التالية :

$$\langle e^2/r_{12}\rangle = \frac{Z^6 e^2}{\pi^3 a_0^6} \int_0^\infty\!\!\int_0^\infty \frac{1}{r_{12}} \, e^{-2\alpha(r_1+r_2)} \, d\tau_1 \, d\tau_2$$

حيث وضعنا في التكامل $\alpha = Z/a_0$. يمكن ان نفهم هذا التكامل بأنه يمثل الطاقة الكهراكدية الناتجة من تفاعل توزعين كهربائيين متناظرين كرويا ، حيث يمثل $e^{-2\alpha r_1}$ و $e^{-2\alpha r_2}$ تابعي كثافتيهما . بناء على هذا المفهوم يجرى التكامل السابق بحساب الكمون الناتج من التوزع الأول وذلك بالمكاملة على $d\tau_1$ ثم تحسب طاقة التوزع الثاني في حقل التوزع الأول .

نعلم من مقرر الكهرباء والمغناطيسية (ويمكن اثبات هذا بسهولة) ان الكمون الناشيء عن قشرة كروية نصف قطرها r_1 وشحنتها $4\pi r_1^2 e^{-2\alpha r_1} dr_1$ عند نقطة تبعد مسافة r عن مركزها هو

$$4\pi r_1^2 e^{-2\alpha r_1} dr_1 \frac{1}{r_1} \quad for \quad r<r_1$$

$$4\pi r_1^2 e^{-2\alpha r_1} dr_1 \frac{1}{r} \quad for \quad r>r_1$$

أى أن الكمون ثابت ضمن القشرة ويساوى الكمون على سطحها ، اما خارج القشرة فيحسب وكأن كل شحنة القشرة مجمعة في مركزها . بناء على هذا يكون الكمون الناشيء عن كل التوزع الأول عن النقطة r :

$$V(r) = \frac{4\pi}{r}\int_0^r e^{-2\alpha r_1} r_1^2 dr_1 + 4\pi\int_r^\infty e^{-2\alpha r_1} r_1 dr_1$$

$$= \frac{\pi}{r}\left[1 - e^{-2\alpha r}(\alpha r+1)\right]$$

وهكذا تكون نتيجة التكامل I المطلوب حسابه

$$I = \int_0^\infty V(r)\, e^{-2\alpha r_2}\, d\tau_2$$

$$= \pi\int_0^\infty \left[1 - e^{-2\alpha r_2}(\alpha r_2+1)\right] e^{-2\alpha r_2}\, 4\pi r_2 dr_2$$

$$= 5\pi^2/8\alpha^5 = \frac{5 e^2 a_0^5}{8 Z^5}$$

وبتعويض هذه النتيجة في (B.1) نحصل على القيمة المتوقعه المطلوبة .

***

الفصل الحادي عشر

نظرية سبين الالكترون ومبدأ الاستبعاد

١٤. النظرية التقليدية لم تكتمل بعد :

سنرى الآن ان النظرية الكوانتية التي بنيت حتى هذه المرحلة لا تستطيع تفسير ظواهر متعددة ، ونكتفي على سبيل المثال بذكر ظاهرتين رئيسيتين تخفق هذه النظرية في تفسيرها .

١- مفعول زيمن الطبيعي يتناقض والتجربة :

لقد تحدثنا بايجاز عن مفعول زيمن في الفصل IX ، وقد وجدنا انه عندما توضع ذرة الهيدروجين في حقل مغناطيسي $\underline{B}$ فانها تسلك سلوك مزوج مغناطيسي عزمه

$$\underline{\mu} = -\frac{e}{2m}\,\underline{r}\times\underline{p} = -\frac{e}{2m}\,\underline{L} \qquad (1.1)$$

وينتج عن هذا امتلاك الذرة لطاقة مغناطيسية كامنة اضافية هي :

$$V_m = -\underline{\mu}\cdot\underline{B} = \frac{e}{2m}\,\underline{B}\cdot\underline{L} \qquad (1.2)$$

وباختيار المحور z منطبقا على اتجاه $\underline{B}$ يمكن كتابة موئثر هاميلتون بالشكل

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} + \frac{eB}{2m}\,\hat{L}_z \qquad (1.3)$$

حيث ان $\hat{H}$ هو موئثر هاميلتون قبل تطبيق الحقل المغناطيسي . بما أن $\hat{H}$ و $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ متآلفة ، اذن لها مجموعة مشتركة كاملة من التوابع الخاصة $\psi_{n\ell m}$ ، كنا قد حسبناها في الفصل IX . بناء على هذا فالتوابع الخاصة لـ $\hat{\mathcal{H}}$ هي التوابع $\psi_{n\ell m}$.

تحقق طاقة الذرة في الحقل المغناطيسي المعادلة الخاصة

$$\hat{\mathcal{H}}\,\psi_{n\ell m} = (\hat{H} + \frac{eB}{2m}\,\hat{L}_z)\,\psi_{n\ell m} \qquad (1.4)$$

$$= (E_n + \frac{eB}{2m}\hbar\, m_\ell)\,\psi_{n\ell m}$$

حيث إن E_n سويات طاقة ذرة الهيدروجين بغياب الحقل المغناطيسي . من أجل قيمتين معطاتين لـ n و ℓ تنقسم سوية الطاقة E_n، باستثناء الحالة S ($\ell=0$)، الى $(2\ell+1)$ سوية جزئية يقابل كل منها قيمة ممكنة لـ m_ℓ، وتختلف كل سويتين متتاليتين منهما بالكمية

$$\Delta E = \frac{eB}{2m} \qquad (1.5)$$

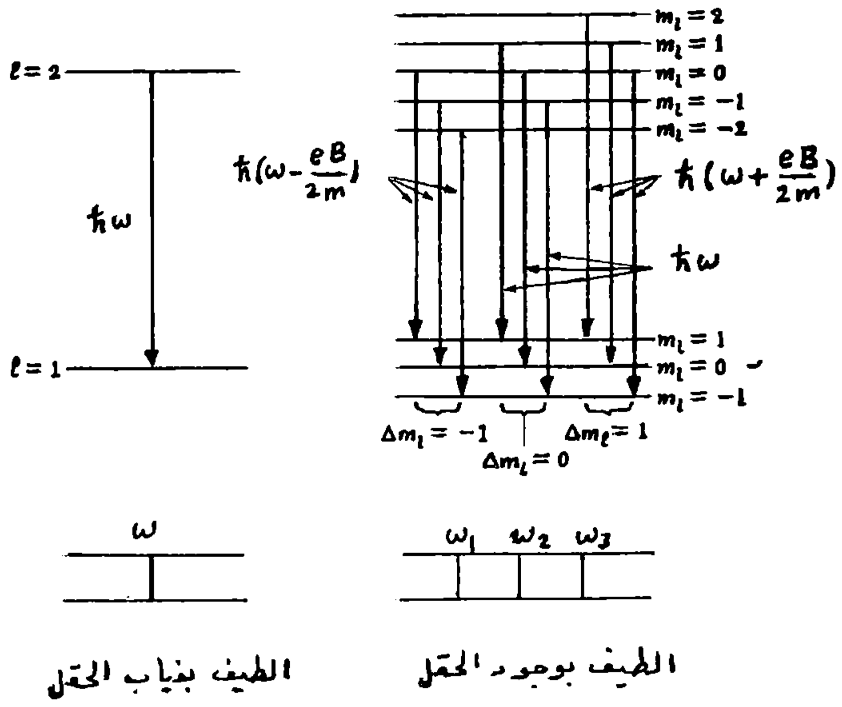
وبذلك يكون لدينا سويات جزئية تزداد طاقاتها تدريجيا بالمقدار (ΔE) بدءاً من $E_n - \ell\,(eB/2m)\,\hbar$ الى ان تصل الى $E_n+\ell\,(eB/2m)\,\hbar$. لقد تم تجريبيا ملاحظة انقسام الخطوط الطيفية لدى وضع الذرة في حقل مغناطيسي ، ولكن قواعد الاصطفاء التي تقيد تغيرات m_ℓ باحدى القيم $\{0, \pm1\}$ تقتضي ان ينقسم كل خط ناتج من الانتقال بين حالتين (وهاتان الحالتان لهما عددان كميان مداريان مختلفان بالتأكيد لأنّ $\Delta\ell = \pm 1$) الى ثلاث مركبات وذلك مهما يكن العددان الكميان الرئيسيان n و n' اللذان يميزان هاتين الحالتين .

يؤدي اذن مفعول زيمن الطبيعي الى انقسام الخط الطيفي ذي التواتر الزاوي ω الى ثلاث مركبات تواتراتها الزاوية

$$\begin{aligned} \omega_+ &= \omega + eB/2m \\ \omega &= \omega \\ \omega_- &= \omega - eB/2m \end{aligned} \qquad (1.6)$$

وعلى حين يمكن ملاحظة مفعول زيمن الطبيعي في طيف بعض العناصر وتحت بعض الشروط ، لكن يمكن في كثير من الاحيان ظهور اربع او ست او اكثر من المركبات الطيفية ، وحتى لدى ظهور ثلاث مركبات لا تكون المسافات الفاصلة بينها متفقة

والعلاقات (١٠٦) .



(ش ١٠)

٢ـ انقسام الخطوط الطيفية :

حتى ولو لم نطبق حقلا مغناطيسيا على الذرة ، فانا نلاحظ تجريبيا ان الخطوط الطيفية للذرات شبه الهيدروجينية والقلوية لا تتفق والنظرية . تتنبأ النظرية بخطوط طيفية مفردة ، ولكن نلاحظ في الواقع ان معظم الخطوط الطيفية مزدوجة وتتركب من خطين منفصلين قريبين جدا من بعضهما ، من أمثلة هذا التركيب الدقيق للخطوط الطيفية الخط الاول في سلسلة بالمر والناتج من انتقال ذرة الهيدروجين من السوية $n = 3$ الى السوية $n = 2$. تقود النبوءة النظرية هنا الى وجود خط طيفي وحيد طول موجته 6,563 A ولكن يوجد في الحقيقة خطان طيفيان يختلفان في طول الموجة بمقدار 1.4 A . من ابرز الامثلة ايضا الثنائية المؤلفة من الخطين الاصفرين او الخطين D للصوديوم ، وهما يوافقان طولي موجة مقدارهما 5,890A و5,896A وسوف نجد تفسير هذه الظاهرة فيما بعد .

2.3. محاولة ترميم النظرية :

في محاولة لتفسير التركيب الدقيق للخطوط الطيفية ومفعول زيمن الشاذ معـــــاً، افترض غـود سميث وأوهلنبيك عام 1925 ان للالكترون عزما حركيا ذاتيا او سبينا $\underline{S}$ مستقلا عن اية قيمة لعزمه الحركي المداري والحقا به عـزما مغناطيسيا $\underline{M}$. ولقـــد اثبتت فرضيـة السبين نجاحا فائقا لا في تفسير البنية الدقيقة للخطوط الطيفية ومفعول زيمن الشاذ فحسب، بل أيضا في مجال عريض آخر من الظواهر الذرية . وفي عام 1928 وضع ديراك اسس ميكانيك الكم النسبـــوي واستطاع ان يبين ان للجسيمات التي لهـــا شحنة الالكترون وكتلته يجب ان يكون لها سبين وعزم مغناطيسي مساويان لما عـــزاه اليها غـود سميث وأوهلنبيك .

يستعمل العدد الكمي s للدلالة على السبين والقيمة الوحيدة التي يأخذهـــا هي $\frac{1}{2}$. ينشأ هذا القيد على قيمة s من نظرية ديراك ، كما يمكن استنتاجه مـــــن المعطيات التجريبية ، فبحسب (١٠٤) يجب الا تنقسم الحالة الدنيا $(n=1,\ell=0,m=0)$، ولكن يلاحظ تجريبيا انقسامها الى حالتين . فاذا كان لهذا الانقسام اسبــــــاب فيزيائية مشابهة لتلك المشروحة لدى الحديث عن مفعول زيمن في البند السابق ، وجب ان نعزو هذا الانقسام المزدوج الى عزم حركي ذاتي $\underline{S}$ للجسيم يحقق العلاقـــــة التالية

$$2s+1=2 \qquad (2.1)$$

حيث ان s هو العدد الكوانتي الذى يحدد طول شعاع السبين $\hat{\underline{S}}$. ولقد رأينـــا في البند السابق ان الحالة الدنيا لا تنقسم بسبب العزم الحركي ، وبذلك فـــــان انقسامها يعود حتما الى سبين الجسيم . يعطى قياس شعاع السبين بالمماثلة مـــع العزم الحركي المداري بالعلاقة التالية :

$$|S|=\sqrt{s(s+1)}\,\hbar=\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \qquad (2.2)$$

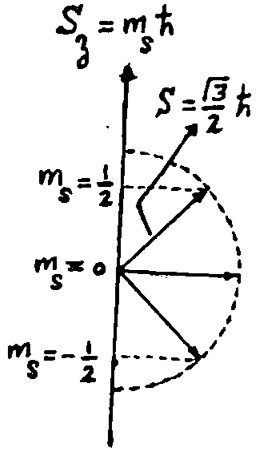
توصف كموميـــة الفراغ بالنسبة لسبين الالكترون بالعدد السبيني المغناطيسي m_s وكما ان شعاع العزم الحركي المداري يمكن ان يأخذ ($2\ell+1$) اتجاها بالنسبة الى

اتجاه معطى ، كذلك يمكن ان يأخذ السبين $2s+1=2$ اتجاها بالنسبة لا تجاه كيفي معطى . يتحدد هذان الاتجاهان بالقيمتين $m_s=1/2$ و $m_s=-1/2$. يوضح الشكل (ش٠٢) كمومية الفراغ لسبين الالكترون .

بالمماثلة ايضا مع العزم الحركي المدارى تأخذ المركبة S_z للسبين القيمتين

$$S_z = m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar \tag{2.7}$$

يقال عن الاتجاه المعين ب $m_s=\frac{1}{2}$ انه مساير للمحور oz او ان سبين الجسيم يتجه للأعلى وقد تدل على هذا الاتجاه بقولنا : سبين للأعلى او سبين (↑) . ويقال عن الاتجاه المعين ب $m_s=-1/2$ انه معاكس ل oz او سبين للأسفل (↓) . هذا على الرغم من أن السبين لا يمكن ان يساير oz او ان يعاكسه .



من الواضح ان ماتم الحديث عنه بخصوص $\hat{S}_z$ ينطبق ايضا على أية مركبة اخرى S_Δ في اتجاه Δ نختاره . اذ تأخذ S_Δ احدى القيمتين $(\pm 1/2)\hbar$) وذلك لأنّ اختيار المحور oz هو رهن ايدينا .

§3 . الجمل ذات السبين 1/2 :

في البند السابق وجدنا ان سبين الالكترون يساوى نصفا . ولا ينفرد الالكترون بهذه الصفة ، فجميع الجسيمات الاولية المستقرة ، مثل الالكترونات والبروتونات والپوزيترونات والنيوترونات ـ والنيوترون مستقر فقط داخل النواة ـ لها سبين يساوى 1/2 .

لن تُجدي المسلمة السابعة أى فائدة في تمثيل السبين لأنه ليس لهذا الاخير نظير كلاسيكي . ويبدو ان السبين يمت الى درجات حرية داخلية للجسيم . وقد يترتب علينا اذا ما تم التوصل يوما الى نظرية اكثر كمالاً أن تدخل هذه المتحولات

الداخلية في الحسبان . وقد تتعلق هذه المتحولات الداخلية باحداثيات جسيمات دقيقة تتركب منها الجسيمات الاولية . ولحسن الحظ يمكن استيعاب السبين في النظرية الكوانتية بأن ندخل في التابع الموجي متحول جديد وحيد m_s يوفر جميع المعلومات التي نبغيها عن السبين . ونذكر بخصوص هذا المتحول الجديد أنه لا يدل بأية حال على فتل للالكترون حول نفسه .

كنا قد رأينا لدى دراسة العزم الحركي المداري ان الطرق الجبرية القائمة على العلاقات التبادلية

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=i\hbar\hat{L}_z\,,\quad[\hat{L}_y,\hat{L}_z]=i\hbar\hat{L}_y\,,\quad[\hat{L}_z,\hat{L}_x]=i\hbar\hat{L}_y \tag{3.1}$$

تعطي للعدد الكمي المداري ℓ ، مجموعة من القيم مؤلفة من الاعداد الصحيحة الموجبة وانصافها ، وقد تم رفض انصاف الاعداد الفردية $\{\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\dots\}$ استنادا الى وحدانية قيمة التابع الموجي ψ عند كل نقطة (x,y,z) من الفراغ . وبما أن السبين هو عزم حركي ذاتي لذلك نرغب ان تحقق مركباته علاقات تبادلية مماثلة لتلك (3.1) التي يحققها العزم الحركي

$$[\hat{S}_x,\hat{S}_y]=i\hbar\hat{S}_z\,,\quad[\hat{S}_y,\hat{S}_z]=i\hbar\hat{S}_x\,,\quad[\hat{S}_z,\hat{S}_x]=i\hbar\hat{S}_y \tag{3.2}$$

ولئلا يتم رفض انصاف الاعداد الفردية مرة ثانية بسبب وحدانية قيم التابع الموجي فيجب ان تكون موئثرات السبين مستقلة عن احداثيات الجسيم ، وهو طلب في غاية الوضوح . وختاما يجب ان ينتج عن العلاقات التبادلية قيمة وحيدة للعدد الكمي السبيني هي $s=1/2$.

§ (3.1) فراغ الحالات السبينية ـ السبينورات :

من المناسب ان نعرف من أجل الكترون سبينه $\underline{S}$ شعاعا $\underline{\Sigma}$ بالمعادلة

$$\underline{S}=\frac{1}{2}\hbar\,\underline{\Sigma} \tag{3.3}$$

يسمى الشعاع $\underline{\Sigma}$ المحور السبيني ، وسوف نرمز لمركباته بالرموز σ_x و σ_y و σ_z . ومن الواضح ان القيم الخاصة لكل من هذه الملحوظات الفيزيائية هي $+1$ و -1 .

لن يهمنا في هذا البند تعلق التابع الموجي باحداثيات الجسيم ، ولذلك سوف نركز انتباهنا على سبين الجسيم فقط مُسقِطين احداثياته من اعتبارنا . ووفقا لما تقتضيه الافادة السابقة نرى أن كلا من المركبات σ_x و σ_y و σ_z يؤلف بحد ذاته مجموعة عظمى من الملحوظات المتآلفة ، وذلك لأنّ هذه المركبات لا تتآلف فيما بينهما ويمكن ان نأخذ $\{\sigma_z\}$ مثلا لتكون هذه المجموعة العظمى ، ونرى ان طيفها هو المجموعة $\{+1, -1\}$. لنرمز بـ ξ_{+1} و ξ_{-1} او اختصارا بـ ξ_+ و ξ_- فقط، للشعاعين الخاصين لـ $\hat{\sigma}_z$ المقابلين على الترتيب للقيمتين الخاصتين $+1$ و -1 .

وبحسب المسلمة الثانية تشكل $\{\xi_+, \xi_-\}$ جملة كاملة من الاشعة في فراغ الحالات السبينية ، بمعنى أنه يمكن ان ننشر كل شعاع حالة سبينية α بدلالة هذين الشعاعين

$$\alpha = a_+ \xi_+ + a_- \xi_- \tag{3.4}$$

وبناء على هذا المنشور نرى أن كل حالة سبينية α تُقابَل في التمثيل - σ_z بعمود مصفوفي (2×1) .

اما الشعاعان الخاصان ξ_+ و ξ_- لـ σ_z فيمثلان وضوحا في التمثيل - σ_z بالعمودين

$$\xi_+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad , \xi_- = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{3.5}$$

نعرف على مجموعة الاعمدة المصفوفية من الشكل (3.5) جداء داخليا

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \alpha^+ \beta = (a_+^* \; a_-^*) \begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} = a_+^* b_+ + a_-^* b_- \tag{3.7}$$

وبذلك يكون نظيم حالة سبينية α معطى بالعلاقة

$$\|\alpha\|^2 = \langle \alpha | \alpha \rangle = a_+^* a_+ + a_-^* a_- = |a_+|^2 + |a_-|^2 \tag{3.8}$$

من الواضح ان ξ_+ و ξ_+ متعامدان وان المنشور (3.4) يكتب ايضا بالشكل المكافىء

$$\alpha = \langle \xi_+ | \alpha \rangle \xi_+ + \langle \xi_- | \alpha \rangle \xi_- \tag{3.9}$$

اذا كانت الحالة السبينية α مستنظمة فنجد بحسب المسلمة السادسة في ميكانيك الكم (تفسير بورن) التفسير الاحتمالي التالي لمركبتي α :

تمثل $|a_+|^2 = |\langle \xi_+|\alpha\rangle|^2$ احتمال أن تأخذ $\hat{\sigma}_z$ القيمة $+1$ عندما تكون الجملة في الحالة α ، ويساوي هذا طبعا احتمال انتقال الجملة من الحالة α الى الحالة ξ_+ .

وتمثل $|a_-|^2 = |\langle \xi_-|\alpha\rangle|^2$ احتمال أن تأخذ $\hat{\sigma}_z$ القيمة -1 عندما تكون الجملة في الحالة α ، ويساوى هذا احتمال انتقال الجملة من الحالة α الى الحالة ξ_- .

أما مجموع الاحتمالين $|a_+|^2 + |a_-|^2$ فيجب ان يساوى الواحد ، وهذا الطلب مضمون باستنظام α كما اشترطنا من البدء .

يدعى كل عمود من الشكل (3.5) سبينور ، وكل عمود من هذه الاعمدة يحتوى عدم تعيين على شكل عامل ضرب $e^{i\theta}$ حيث ان θ عدد حقيقي كيفي ، وعامل الضرب هذا لا يغير شيئا في التفسير الاحتمالي لـ a_+ و a_- . وبالطبع فان كل حالة من فراغ الحالات السبينية تمثل بسبينور ، ويمكن القول ان مجموعة هذه السبينورات كافة (بإهمال الاحداثيات) هي فراغ الحالات السبينية .

تمرين : احسب القيمة المتوقعة لـ $\hat{S}_z$ لما تكون الجملة في الحالة المستنظمة α .

الحل : بحسب حساب الاحتمال تساوى هذه القيمة مجموع النتائج الممكنة لقياس $\hat{S}_z$ مضروبة في الاحتمالات الموافقة لها ، وعليه نجد

$$\langle \hat{S}_z \rangle_\alpha = \tfrac{1}{2}\hbar\, P(\tfrac{1}{2}\hbar) + (-\tfrac{1}{2}\hbar)\, P(-\tfrac{1}{2}\hbar) \tag{3.10}$$

$$= \tfrac{1}{2}\hbar\, P(\alpha \to \xi_+) - \tfrac{1}{2}\hbar\, P(\alpha \to \xi_-)$$

$$= \tfrac{1}{2}\hbar\, |\langle \alpha|\xi_+\rangle|^2 - \tfrac{1}{2}\hbar\, |\langle \alpha|\xi_-\rangle|^2$$

$$= \tfrac{1}{2}\hbar\, |a_+|^2 - \tfrac{1}{2}\hbar\, |a_-|^2$$

§(3.2) مصفوفات باولي :

بما ان السبينور الممثل لحالة سبينية عمود (2×1) لذلك يجب ان تمثل مؤثرات السبين بمصفوفات مربعة (2×2) . وحيث اننا نستخدم التمثيل - σ_z لذا يجب ان تكون المصفوفة الممثلة له مصفوفة قطرية تتألف عناصر قطرها من القيم الخاصة لـ σ_z . وعليه فان

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.11}$$

وتكون المصفوفة الممثلة لـ σ_z^2 هي

$$\hat{\sigma}_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I_2 \tag{3.12}$$

وهذه النتيجة متوقعة وواضحة لان σ_z تأخذ احدى قيمتين $+1$ أو -1 ، بينما يأخذ مربعها σ_z^2 قيمة وحيدة $+1$ ، ولذلك فهو يمثل بمصفوفة الواحدة I_2 . وبما أن σ_x و σ_y يأخذان احدى القيمتين $+1$ او -1 ايضا وان مربعيهما σ_x^2 و σ_y^2 يأخذان فقط القيمة $+1$ ، لذلك يمثل هذان الملحوظان بمصفوفة الواحدة ايضا :

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = I_2 \tag{3.13}$$

ليكن σ_o مركبة $\underline{\Sigma}$ وفق اتجاه ما معين بشعاع الواحدة $\underline{u} = (\ell, m, n)$ بالنسبة للمحاور $oxyz$. فنجد أن

$$\sigma_o = \ell\,\sigma_x + m\,\sigma_y + n\,\sigma_z = \underline{u}\cdot\underline{\Sigma} \tag{3.14}$$

واذا كانت $\hat{\sigma}_o$ المصفوفة الممثلة لـ σ_o كان

$$\hat{\sigma}_o = \ell\,\hat{\sigma}_x + m\,\hat{\sigma}_y + n\,\hat{\sigma}_z \tag{3.15}$$

وبما ان مربع قيمة σ_o هي $+1$ حتما لذلك فان

$$\hat{\sigma}_o^2 = I_2 \tag{3.16}$$

ونجد الآن بتعويض $\hat{\sigma}_o$ من (3.15) في (3.16) العلاقة

$$\ell^2 \hat{\sigma}_x^2 + m^2 \hat{\sigma}_y^2 + n^2 \hat{\sigma}_z^2 + mn(\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y) + n\ell(\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z) + \ell m(\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x) = I_2 \quad (3.17)$$

وبتعويض $\hat{\sigma}_x^2$ و $\hat{\sigma}_y^2$ و $\hat{\sigma}_z^2$ بالمصفوفة I_2 نجد أن (3.17) تؤول الى

$$mn(\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y) + n\ell(\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z) + \ell m(\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x) = 0 \quad (3.18)$$

بأخذ $\ell = 0$ و $m \neq 0$ و $n \neq 0$ نحصل على النتيجة

$$\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = \hat{0} \quad (3.19)$$

وبطريقة مماثلة نجد

$$\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = \hat{0} \quad (2.20)$$

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = \hat{0} \quad (3.21)$$

بأخذ

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

وملاحظة أن $\hat{\sigma}_z$ معطى بالمعادلة (3.12) نجد بعد التعويض في المعادلة (3.20) ان

$$a = c = 0 \quad (3.23)$$

ونحصل على نتيجة مماثلة بخصوص $\hat{\sigma}_y$ ، وعليه وبأخذ

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & d \\ d^* & 0 \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

والتعويض في (3.21) نجد أن

$$bd^* + b^*d = 0 \quad (3.25)$$

ينتج ايضا من المعادلة (3.13) أن

$$bb^* = dd^* = 1 \quad (3.26)$$

ولهذا يمكن ان نضع

$$b = e^{i\theta} \quad و \quad d = e^{i\varphi} \quad (3.27)$$

وبحسب المعادلة (3.25) نجد أن

$$e^{2i\varphi} = -e^{2i\theta} \tag{3.28a}$$

$$\Rightarrow e^{i\varphi} = -i\, e^{i\theta} \tag{3.28b}$$

(تظهر اشارة - مبهمة لدى الانتقال من (3.28a) الى (3.28b) وقد تم اختيار هذه الاشارة لكي تتفق نتائجنا في شكلها مع المصطلحات الموجودة) وهكذا نجد الآن ان المصفوفات $\hat{\sigma}_x$ و $\hat{\sigma}_y$ قد ارجعت الى الشكل

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{i\theta} \\ ie^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix} \tag{3.29}$$

ويمكن تسبيط هذين الشكلين بتدوير المستوى oxy بزاوية $-\theta$، فاذا كان ox' و oy' المحورين الجديدين كان

$$\begin{aligned} \sigma_{x'} &= \sigma_x \cos\theta + \sigma_y \sin\theta \\ \sigma_{y'} &= -\sigma_x \sin\theta + \sigma_y \cos\theta \end{aligned} \tag{3.30}$$

وكانت المصفوفات الممثلة لمركبات محور السبين مرتبطة بالعلاقات السابقة نفسها . ينتج من هذا أن

$$\sigma_{x'} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_{y'} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{3.31}$$

وبتسمية المحاور $ox'y'z'$ من جديد $oxyz$ نجد الشكل النهائي للمصفوفات الممثلة لمركبات المحور السبيني

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.32}$$

§ (3.3) خواص مصفوفات باولي :

يمكن التحقق بسهولة من أن مصفوفات باولي تحقق الخواص التالية (وبعضها معلوم سلفا ولكن نُثبّتُ هنا على سبيل تجميع هذه الخواص)

١) واحدية : $\hat{\sigma}_x^{+} = \hat{\sigma}_x^{-1}$ و $\hat{\sigma}_y^{+} = \hat{\sigma}_y^{-1}$ و $\hat{\sigma}_z^{+} = \hat{\sigma}_z^{-1}$ (3.33)

٢) هرميتية $\hat{\sigma}_x^{\dagger} = \hat{\sigma}_x$ و $\hat{\sigma}_y^{\dagger} = \hat{\sigma}_y$ و $\hat{\sigma}_z = \sigma_z$ (3.34)

٣) من (1) و(2) نجد أن $\hat{\sigma}_x = \hat{\sigma}_x^{-1}$ و $\hat{\sigma}_y = \hat{\sigma}_y^{-1}$ و $\hat{\sigma}_z = \hat{\sigma}_z^{-1}$ ومنه

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = I_2 \qquad (3.35)$$

٤) يتألف طيف كل منها من المجموعة $\{+1 , -1\}$

٥) تحقق العلاقات

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x &= 0 \\ \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y &= 0 \\ \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z &= 0 \end{aligned} \qquad (3.36)$$

ولذلك يقال عنها انها ضد تبديلية

٦) تحقق العلاقات

$$\begin{aligned} i\,\sigma_x &= \sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y \\ i\,\sigma_y &= \sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z \\ i\,\sigma_z &= \sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x \end{aligned} \qquad (3.37)$$

٧) تحقق العلاقات التبادلية التالية :

$$\begin{aligned} [\sigma_x , \sigma_y] &= 2i\,\sigma_z \\ [\sigma_y , \sigma_z] &= 2i\,\sigma_x \\ [\sigma_z , \sigma_x] &= 2i\,\sigma_y \end{aligned} \qquad (3.38)$$

٨) معدومة الآثار

$$\mathrm{Trace}\ \hat{\sigma}_x = \mathrm{Trace}\ \hat{\sigma}_y = \mathrm{Trace}\ \hat{\sigma}_z = 0 \qquad (3.39)$$

٩) ذات معينات يساوى كل منها 1- .

$$|\hat{\sigma}_x| = |\hat{\sigma}_y| = |\sigma_z| = -1 \qquad (3.40)$$

١٠) تحقق العلاقة

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z = i\,I_2 \qquad (3.41)$$

§ (3.4) موؤثرات السبين :

من المعادلة (3.3) نجد ان مركبات السبين تمثل بالموؤثرات

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}\hbar\,\hat{\sigma}_x \;,\; \hat{S}_y = \frac{1}{2}\hbar\,\hat{\sigma}_y \;,\; \hat{S}_z = \frac{1}{2}\hbar\,\hat{\sigma}_z \qquad (3.42)$$

وتحقق هذه الموؤثرات بالاستناد الى العلاقات التبادلية (3.38) التي تحققها مركبات $\hat{\underline{\sigma}}$ العلاقات التبادلية (3.2) .

أما موؤثر مربع السبين فيمثل بالموؤثر

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 &= \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \\ &= (\tfrac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_x)^2 + (\tfrac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_y)^2 + (\tfrac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_z)^2 \\ &= \tfrac{3}{4}\hbar^2 I_2 = \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)\hbar^2 I_2 \end{aligned} \qquad (3.43)$$

والنتيجة الاخيرة واضحة ولا تحتاج الى حساب فنحن نعلم ان $|S|^2$ يأخذ قيمة وحيدة هي $\frac{3}{4}\hbar^2$ ولذلك يجب تمثيله بمصفوفة الواحدة مضروبة بقيمته . من الواضح ايضا ان $\hat{S}^2$ يتآلف مع مركبات $\hat{\underline{S}}$ كافة

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_x] = [\hat{S}^2, \hat{S}_y] = [\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0 \qquad (3.44)$$

تدل (3.43) على أن العدد الكمي السبيني s يساوي 1/2 في كل حالة سبينية

§ (3.5) تمارين محلولة :

١ . اذا كانت الجملة في حالة سبينية α . فما هو احتمال انتقال الجملة الى حالة α' ؟

$$P(\alpha \rightarrow \alpha') = |\langle\alpha|\alpha'\rangle|^2 = |a_+^* a'_+ + a_-^* a'_-|^2 \qquad (3.45)$$

٢ . عين الاحتمال السابق لما تكون α' مساوية على التوالي الى ξ_+ و ξ_- .

بوضع $a'_+ = 1$ و $a'_- = 0$ في العلاقة السابقة نجد $P(\alpha \to \xi_+) = |a_+|^2$

وبوضع $a'_+ = 0$ و $a'_- = 1$ في العلاقة (3.45) نجد $P(\alpha \to \xi_-) = |a_-|^2$

وبشكل خاص اذا كانت $\alpha = \xi_+$ نجد بوضع $a_+ = 1$ و $a_- = 0$ أن

$$P(\xi_+ \to \xi_-) = 0 \quad \text{و} \quad P(\xi_+ \to \xi_+) = 1$$

وهذا ما يتفق طبعا مع المسلمة الرابعة

٣ . اكتب المصفوفة الممثلة للملحوظ $\hat{\sigma}_0$ الممثل لمركبة السبين في الاتجاه $u = (\ell, m, n)$ ثم عين بالحساب قيمه واشعته الخاصة .

بالتعويض بعبارات مصفوفات باولي من (3.32) في (3.15) نجد

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} n & \ell - im \\ \ell + im & -n \end{pmatrix} \tag{3.46}$$

اذا كانت θ الزاوية بين u و oz وكانت ϕ الزاوية بين مسقط u على المستـــــوى oxy، أي (ℓ, m, o)، والمحور x كان

$$\ell = \sin\theta\cos\phi \qquad m = \sin\theta\sin\phi \qquad n = \cos\theta \tag{3.47}$$

وبالتعويض في (3.46) نجد

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} \cos\theta & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{3.48}$$

وتكتب المعادلة الخاصة الموافقة $\hat{\sigma}_0 \alpha = \lambda\alpha$ بالشكل

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix} \tag{3.49}$$

وهذا يكافىء المعادلتين

$$a_+\cos\theta + a_- e^{-i\phi}\sin\theta = \lambda a_+ \tag{3.50}$$

$$a_+ e^{i\phi}\sin\theta - a_-\cos\theta = \lambda a_- \tag{3.51}$$

وشرط وجود حل غير تافه لهاتين المعادلتين في a_+ و a_- هو انعدام معيـــــن الامثال

$$(3.52)\qquad \begin{vmatrix} \cos\theta-\lambda & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

وبفك هذا المعين نجد $\lambda^2 = 1$ وعليه فان القيمتين الخاصتين ل $\hat{\sigma}_0$ هما ± 1. اذا كانت $\lambda = 1$ نجد من أى من المعادلتين (3.50) أو (3.51) أن

$$(3.53)\qquad \frac{a_+}{a_-} = \frac{e^{-i\phi}\cos\frac{1}{2}\theta}{\sin\frac{1}{2}\theta}$$

وبما ان α مستنظمة ، يكون

$$a_+ a_+^* + a_- a_-^* = 1$$

وعليه نجد ان الشعاع الخاص لهذه الحالة هو

$$(3.55)\qquad \alpha_+ = e^{i\gamma}\begin{pmatrix} e^{-i\phi}\cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}$$

حيث ان γ عدد حقيقي كيفي . وبالطريقة نفسها نجد الشعاع الخاص الموافق للقيمة الخاصة $\lambda = -1$ ، والشكل المستنظم لهذا الشعاع هو

$$\alpha_- = e^{i\delta}\begin{pmatrix} -e^{-i\phi}\sin\frac{1}{2}\theta \\ \cos\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}$$

حيث ان δ عدد حقيقي كيفي . ويمكن اختيار γ و δ في العلاقتين السابقتين مساويتين للصفر فيكون

$$(3.56)\qquad \alpha_+ = \begin{pmatrix} e^{-i\phi}\cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}, \quad \alpha_- = \begin{pmatrix} -e^{-i\phi}\sin\frac{1}{2}\theta \\ \cos\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}$$

٤ . اذا قسنا المركبة $\hat{\sigma}_0$ فوجدنا انها تساوى $+1$، ما هو احتمال ان تعطى تجربة قياس لاحق للمركبة $\hat{\sigma}_3$ القيمة $+1$ ؟ القيمة -1 ؟

تحضر تجربة القياس الأولى الجملة في الحالة α_+

$$\alpha_+ = e^{i\phi} \cos \tfrac{1}{2}\theta \, \xi_+ + \sin \tfrac{1}{2}\theta \, \xi_- \qquad (3.58)$$

وعليه يكون احتمال الحصول على $\sigma_z = 1$ في التجربة الثانية مساويا الى $\cos^2 \frac{1}{2}\theta$ ، واحتمال الحصول على $\sigma_z = -1$ في التجربة الثانية مساويا الى $\sin^2 \frac{1}{2}\theta$.

اما اذا نتج عن تجربة القياس الأولى القيمة $\sigma_o = -1$ فنجد في التجربة الثانيــة لقياس σ_z ان احتمالي الحصول على $\sigma_z = 1$ و $\sigma_z = -1$ هما $\sin^2 \frac{1}{2}\theta$ و $\cos^2 \frac{1}{2}\theta$ على الترتيب

٥ . احسب بدءاً من العلاقة (5.37) الاشعة الخاصة لـ $\hat{\sigma}_x$ و $\hat{\sigma}_y$.

لنرمز بـ η_+ و η_- للشعاعين الخاصين لـ $\hat{\sigma}_x$ وبـ χ_+ و χ_- للشعاعين الخاصين لـ $\hat{\sigma}_y$ فنجد بوضع $\theta = \frac{\pi}{2}$ و $\phi = 0$ في (3.57) أن

$$\eta_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad \eta_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

وبوضع $\theta = \frac{\pi}{2}$ و $\phi = \frac{\pi}{2}$ في (3.57) نجد :

$$\chi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad \chi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}$$

ويكون احتمال الانتقال من الحالة $\sigma_z = 1$ الى الحالة $\sigma_x = 1$ مساو الى $\frac{1}{2}$ ويساوى احتمال انتقال الجملة من الحالة $\sigma_z = 1$ الى الحالة $\sigma_x = -1$.

٦ . احسب القيم المتوقعة لـ σ_x و σ_y و σ_z لما تكون الجملة في الحالة $\sigma_o = +1$ أى في الحالة α_+)

$$\langle \sigma_x \rangle_{\alpha_+} = (e^{i\phi} \cos \tfrac{1}{2}\theta, \sin \tfrac{1}{2}\theta) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \cos \frac{1}{2}\theta \\ \sin \frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}$$

$$= \tfrac{1}{2} e^{+i\phi} \sin\theta + \tfrac{1}{2} e^{-i\phi} \sin\theta = \sin\theta \cos\phi$$

وبالطريقة نفسها نجد أن

$$\langle \sigma_y \rangle_{\alpha_+} = \langle \alpha_+ | \sigma_y | \alpha_+ \rangle = \sin\theta \sin\phi \qquad (3.62)$$

$$(3.63)\qquad \langle \sigma_z \rangle_{\alpha_+} = \langle \alpha_+ | \sigma_z | \alpha_+ \rangle = \cos^2 \tfrac{1}{2}\theta - \sin^2 \tfrac{1}{2}\theta$$

٧ . احسب تشتت الملحوظات σ_x و σ_y و σ_z لما تكون الجملة في الحالة $\sigma_z = 1$ (أى في الحالة ξ_+) .

بوضع $\theta = 0$ في العلاقات (3.61) و (3.62) و (3.63) نجد :

$$(3.64)\qquad \langle \hat{\sigma}_x \rangle_{\xi_+} = 0 \quad و \quad \langle \hat{\sigma}_y \rangle_{\xi_+} = 0 \quad و \quad \langle \hat{\sigma}_z \rangle_{\xi_+} = 1$$

وبناء على هذه النتائج نجد :

$$(3.65)\qquad \mathrm{Var}_{\xi_+} \hat{\sigma}_x = \langle \hat{\sigma}_x^2 \rangle - \langle \hat{\sigma}_x \rangle^2 = \langle I_2 \rangle_{\xi_+} - 0 = 1$$

$$(3.66)\qquad \mathrm{Var}_{\xi_+} \hat{\sigma}_y = \langle \hat{\sigma}_y^2 \rangle - \langle \hat{\sigma}_y \rangle^2 = \langle I_2 \rangle_{\xi_+} - 0 = 1$$

$$(3.67)\qquad \mathrm{Var}_{\xi_+} \hat{\sigma}_z = \langle \hat{\sigma}_z^2 \rangle - \langle \hat{\sigma}_z \rangle^2 = \langle I_2 \rangle_{\xi_+} - 1 = 0$$

ومن الواضح ان $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = I_2$ في كل حالة وان $\mathrm{Var}_{\xi_+} \sigma_z$ معدوم لأنّ ξ_+ حالـــة خاصة ل $\hat{\sigma}_z$.

٨ . استنتج علاقة الارتياب المتعلقة بالملحوظين $\hat{S}_x$ و $\hat{S}_y$.

بما ان

$$(3.68)\qquad [\hat{S}_x , \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z$$

لذلك يكون

$$(3.69)\qquad \Delta \hat{S}_x \cdot \Delta \hat{S}_y \geqslant \tfrac{1}{2}\hbar |\langle S_z \rangle|$$

وفي حالة خاصة لما تكون الجملة في الحالة ξ_+ نجد :

$$(3.70)\qquad \Delta \hat{S}_x \cdot \Delta \hat{S}_y \geqslant \hbar^2/4$$

وبالحقيقة ان العلاقات (3.65) و (3.66) تدل على أن

$$(3.71)\qquad \mathrm{Var}\, \hat{S}_x = \mathrm{Var}\, \hat{S}_y = \hbar^2/4$$

عندما تكون الجملة في الحالة ξ_+ . وعليه فان

$$(3.72)\qquad \Delta \hat{S}_x = \Delta \hat{S}_y = \hbar/2 .$$

§٤. جملة افتراضية من جسيمين متمايزين :

لنعتبر جملة افتراضية مؤلفة من جسيمين يساوى سبين كل منهما $1/2$. ونفرض أن الجسيمين متمايزان (أى لا تتألف الجملة من الكترونين او بروتونين مثلا)والا لخضعت الحالات السبينية للجملة الى قيد اضافي سوف ندرسه في البحوث اللاحقة . يمكن الاستفادة من التطبيق الذى تمت دراسته في (IV . 3) ونقله الى مسألتنا نقلا مباشرا .

ليكن $\hat{S}_{z1}$ و $\hat{S}_{z2}$ مركبتي سبيني الجسيمين على المحور z . تؤلف الحالات الخاصة للجملة

$$\hat{S}_{z1} = \tfrac{1}{2}\hbar,\ \hat{S}_{z2} = \tfrac{1}{2}\hbar \quad (\chi_{11}\ \text{الحالة الخاصة})$$
$$\hat{S}_{z1} = \tfrac{1}{2}\hbar,\ \hat{S}_{z2} = -\tfrac{1}{2}\hbar \quad (\chi_{12}\ \text{الحالة الخاصة})$$
$$\hat{S}_{z1} = -\tfrac{1}{2}\hbar,\ \hat{S}_{z2} = \tfrac{1}{2}\hbar \quad (\chi_{21}\ \text{الحالة الخاصة})$$
$$\hat{S}_{z1} = -\tfrac{1}{2}\hbar,\ \hat{S}_{z2} = -\tfrac{1}{2}\hbar \quad (\chi_{22}\ \text{الحالة الخاصة})$$

جملة اشعة كاملة . تمثّل الحالات السبينية للجملة بدلالة هذه الجملة الكاملة من الاشعة بأعمدة (4.1) عناصرها $(\gamma_{11}, \gamma_{12}, \gamma_{21}, \gamma_{22})$ ، حيث إن $|\gamma_{ij}|^2$ هو احتمال انتقال الجملة من الحالة السبينية المعطاة للجملة الى الحالة χ_{ij} . وتمثل الملحوظات الفيزيائية (السبينية) بمصفوفات (4×4) .

لنعتبر $\hat{S}_{x1}$ كملحوظ يتعلق بالجملة ككل . بحسب المعادلة (IV . 3.28) يمثل هذا الملحوظ بالمصفوفة التالية :

$$\hat{S}_{x1} = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (4.2)$$

وبالمثل نرى بحسب المعادلة (IV . 3.30) ان المصفوفة الممثلة لـ $\hat{S}_{x2}$ معتبرا كملحوظ يتعلق بالجملة ككل

$$\hat{S}_{x2} = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

نعرف شعاع السبين الحاصل للجملة بالعلاقة

$$\hat{\underline{S}} = \hat{\underline{S}}_1 + \hat{\underline{S}}_2 \qquad (4.4)$$

التي تكافىء العلاقات التالية

$$\hat{S}_x = \hat{S}_{x1} + \hat{S}_{x2} \ , \ \hat{S}_y = \hat{S}_{y1} + \hat{S}_{y2} \ , \ \hat{S}_z = \hat{S}_{z1} + \hat{S}_{z2}$$

نجد من العلاقتين (4.2) و (4.3) ان المصفوفة الممثلة لمركبة السبين الحاصل $\hat{S}_x$ هي

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

من الواضح من المعادلة الأولى في (4.5) ان $\hat{S}_x$ يملك القيم الخاصة $\hbar$ و 0 و $-\hbar$.

يُترك للقارىء التحقق من ان هذه القيم هي القيم الخاصة محسوبة من المعادلة المميزة للمصفوفة $\hat{S}_x$ المعطاة بالمعادلة (4.6) . تظهر هذه المعادلة أن القيمة الخاصة 0 مضاعفة (متحللة من المرتبة الثانية) وهي توافق الحالتين

$$\eta_{12} \Leftrightarrow S_{x1} = \frac{1}{2}\hbar \ , \ S_{x2} = -\frac{1}{2}\hbar$$

$$\eta_{21} \Leftrightarrow S_{x1} = -\frac{1}{2}\hbar \ , \ S_{x2} = \frac{1}{2}\hbar$$

تحسب المصفوفتان الممثلتان لـ و بطريقة مشابهة ونجد انهما

$$\hat{S}_y = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & -i & 0 \\ i & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & -i \\ 0 & i & i & 0 \end{pmatrix} , \ \hat{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (4.8)$$

والقيم الخاصة لكل من هذين الملحوظين هي $\hbar$ و ٥ و $-\hbar$، والقيمة الخاصة ٥ متحللة من المرتبة الثانية .

يمكن القارئ ان يتحقق بسهولة من أن الملحوظات $\hat{S}_x$ و $\hat{S}_y$ و $\hat{S}_z$ تحقق العلاقات التبادلية (3.2) ، وذلك بالاستفادة من (4.4) ومن العلاقات التبادلية التي تحققها مركبات $\hat{S}_1$ و $\hat{S}_2$ وهي (3.2) . كما يمكنه ان يتحقق انها ليست ضد تبديلية . بتعريف مربع السبين الحاصل بالعلاقة .

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z \qquad (4.9)$$

نجد من (4.6) و (4.8) ان المصفوفة الممثلة هي :

$$S^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \qquad (4.10)$$

ومن السهل البرهان على أن القيم الخاصة لـ S^2 هي ٥ و $2\hbar^2$.

يمكن القارئ ان يحسب من أجل التمرين الاشعة الخاصة $\hat{S}^2$ و S_z وسوف يجد أنه ، من أجل $S^2=0$ يوجد شعاع خاص وحيد يكون من أجله $S_z=0$ والسبينور الخاص المقابل هو

$$\sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad (4.11)$$

اذا كان $S^2 = 2\hbar^2$ فتوجد ثلاثة اشعة خاصة تقابل القيم $\hbar$- و ٥ و $+\hbar$ للمركبة $\hat{S}_z$ ، وهي

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad (4.13)$$

على الترتيب . يقال عن الحالة (4.11) انها متوحدة وعن الحالات (4.13) انها عناصر من حالة ثلاثية .

ثمة طريقة ابسط لحساب قيم $\hat{S}^2$ و $\hat{S}_z$ المتعلقة بالجملة ككل . اذا رمزنا ب s_1 (s_2) للعدد الكمي الذى يعين طويلة سبين الجملة الاولى (الثانية) ب m_1 (m_2) للعدد السبيني المغناطيسي الموافق ، ورمزنا ب s للعدد الكوانتي الذى يعين طويلة سبين الجملة ككل وب m للعدد السبيني المغناطيسي الموافق، كان بحسب (4.5) .

$$m = m_1 + m_2 \qquad (4.14)$$

وكانت قيم m الممكنة هي $+1$ او 0 او -1 . وبحسب قاعدة جمع العزوم الحركية في VIII يأخذ s كافة القيم الصحيحة المعينة بالعلاقة

$$|s_1 - s_2| \leq s \leq s_1 + s_2 \qquad (4.15)$$

أى يأخذ القيم 0 أو $+1$.

في التمثيل $\{\hat{S}^2, \hat{S}_z\}$ تكون $\hat{S}^2$ و $\hat{S}_z$ مصفوفتين قطريتين

$$\hat{S}^2 = diag\,[0, 2, 2, 2] \qquad (4.16)$$

$$\hat{S}_z = diag\,[0, 1, 0, -1] \qquad (4.17)$$

يجب أن نلاحظ أن كل محاكمتنا السابقة تقوم على ان الجسيمين متمايزان ولا يتفاعلان فيما بينهما . اما اذا كان الجسيمان غير متمايزين فيجب ادخال تعديلات جذرية على هذه المحاكمة . من اوضح هذه التعديلات ان الحالتين χ_{12} و χ_{21} لا تختلفان عن بعضهما في حالة عدم تمايز الجسيمين ، ولذلك تتألف مجموعة كاملة من السبينورات من عدد اقل من 4 . سوف نتعرض لهذه التعديلات في § 11 و § 12 .

٥.٤ ترنح سبين الالكترون :

لنفترض أنه لدينا جملة مؤلفة من الكترون في حقل مغناطيسي خارجي منتظم $\underline{B}$. يملك الالكترون بسبب تفاعل السبين والحقل طاقة V_s . واذا ركزنا اهتمامنا على السبين واهملنا الجزء المكاني من التابع الموجي كتبت المعادلة الخاصة السبينية بعد اختيار المحور z باتجاه الحقل على الشكل

$$\hat{H}_s \xi = \frac{e}{m} B \hat{S}_z \xi = E \xi \qquad (5.1)$$

حيث ان مؤثر هاميلتون $\hat{H}_s$ هنا مطابق لـ V_s. اما قيم الطاقة السبينية فهي بحسب المعادلة (2.3) تساوي

$$E_\pm = \pm e B \hbar / 2m \qquad (5.2)$$

لنفرض انه في لحظة $t = 0$ تم قياس مركبة $\hat{S}$ باتجاه ox ، فتتهيأ الجملة بحسب المسلمة الرابعة بفعل عملية القياس في حالة خاصة لـ $\hat{S}_x$ تقابل القيمة الخاصة الحاصلة ($\hat{S}_x$ بمفردة مجموعة كاملة) . ان نتيجة عملية القياس هي بالتأكيد احدى القيمتين $\frac{1}{2}\hbar$ او $-\frac{1}{2}\hbar$. اذا كانت نتيجة القياس $\frac{1}{2}\hbar$ ، تتهيأ الجملة عقب القياس مباشرة في حالة خاصة $\xi(0)$ معينة بالمعادلة الخاصة

$$S_x \xi(0) = \frac{1}{2}\hbar \, \xi(0) \qquad (5.3)$$

التي نجد منها بعد الاستنظام ان

$$\xi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad (5.4)$$

ويعطى التغير الزمني لتابع الحالة $\xi(t)$ بمعادلة شرودنجر

$$H_s \xi(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \xi(t) \qquad (5.5)$$

أي أن

$$\frac{e\hbar}{2m} B \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix} \qquad (5.6)$$

يعطى حل المعادلة الاخيرة تحت الشرط الابتدائي (5.4) بالعلاقة

$$\xi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ e^{i\omega t/2} \end{bmatrix} \tag{5.7}$$

وهكذا يكون اذن

$$\hat{S}_x \xi(t=0) = \frac{1}{2}\hbar\, \xi(t=0) \tag{5.8}$$

مما يعني ان السبين يتوجه في اللحظة $t=0$ مسايرا للمحور ox. في لحظة لاحقة $t=\pi/2\omega$، وبالاستفادة من عبارة $\hat{S}_y$ ومن (5.7)، نجد أن

$$\hat{S}_y \xi(\frac{\pi}{2\omega}) = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} e^{-i\pi/4} \\ e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} -i\, e^{i\pi/4} \\ i\, e^{-i\pi/4} \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} e^{-i\pi/4} \\ e^{i\pi/4} \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\, \xi(\frac{\pi}{2\omega}) \tag{5.9}$$

تدل هذه المعادلة على أن السبين يتجه في اللحظة $t=\pi/2\omega$ مسايرا لـ $+y$.

بطريقة مشابهة ، تدل العلاقات

$$\hat{S}_x \xi(\frac{\pi}{\omega}) = -\frac{1}{2}\hbar\, \xi(\frac{\pi}{\omega}) \tag{5.10}$$

$$\hat{S}_y \xi(\frac{2\pi}{3\omega}) = -\frac{1}{2}\hbar\, \xi(\frac{3\pi}{2\omega}) \tag{5.11}$$

على ان السبين يتجه بعكس ox في اللحظة $t=\pi/\omega$، ثم بعكس المحور oy في اللحظة $t=3\pi/2\omega$. ويحدث هذا الترنح للسبين حول $\underline{B}$ بتواتر زاوي قدره $\omega = eB/m$.

يمكن الحصول على هذه النتيجة ايضا بحساب القيمة المتوقعة للسبين في اتجاه ox:

$$\langle S_x \rangle = \langle \xi(t) | S_x | \xi(t) \rangle$$

$$\left[e^{i\omega t/2} \ , e^{-i\omega t/2} \right] \hat{S}_x \begin{bmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ e^{i\omega t/2} \end{bmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{4} \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right) = \frac{\hbar}{2} \cos \omega t . \qquad (5.12)$$

نرى من هذه النتيجة ان القيمة المتوقعة للمركبة x للسبين تترجح بتواتر زاوى ω . ويمكن ان نبرهن ان المركبة y تترجح بالتواتر نفسه

$$\langle \hat{S}_y \rangle = \frac{1}{2} \hbar \sin \omega t \qquad (5.13)$$

يمكن ان نصل الى هذه النتيجة بطريقة اخرى . لنعتبر المؤثر

$$\hat{S}_{xy} = \hat{S}_x \cos \omega t + \hat{S}_y \sin \omega t = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \qquad (5.14)$$

الذى يمثل مركبة السبين في المستوى oxy على محور يدور بسرعة زاوية ω حـــول المحور oz ، فيكون

$$\hat{S}_{xy} \xi(t) = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ e^{i\omega t/2} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \hbar \, \xi(t) \qquad (5.15)$$

وتدل هذه المعادلة على أن تابع الحالة $\xi(t)$ المعطى بالمعادلة (5.7) هـــو تابع خاص لـ $\hat{S}_{xy}$ ، مما يعني ان للسبين مركبة ثابتة $\frac{1}{2}\hbar$ على المحور الدوار ، وهـي نتيجة مطابقة لتلك التي حصلنا عليها وفق اعتبارات اخرى .

§6. استيعاب السبين في النظرية الكوانتية :

قبل اعتبار السبين كان التابع الموجي $\Psi(\underline{r}, t)$ كمية سلمية ، أي أنه كمية لها في كل لحظة t قيمة محددة عند كل نقطة $\underline{r}$ من الفراغ بصورة مستقلة عن جملة الاحداثيات المستعملة . تشمل التعديلات التي ندخلها على النظرية الكوانتية البسيطة التابع الموجي والمؤثرات الممثلة للملحوظات الفيزيائية .

١ . التابع الموجي : ندخل في التابع الموجي متحولا جديدا هو m_s بقصد استيعاب السبين فيه ، حيث يرمز m_s الى المركبة z للسبين . ندعو التابعين $\Psi(\underline{r}, t, m_s)$ الموافقين للقيمتين $m_s = \pm 1/2$ مركبتي التابع الموجي Ψ ، ويمكن اذن ان يكتب التابع الموجي على شكل سبينور ذي مركبتين

$$\Psi = \begin{bmatrix} \Psi(\underline{r},t,\frac{1}{2}) \\ \Psi(\underline{r},t,-\frac{1}{2}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Psi_{1/2} \\ \Psi_{-1/2} \end{bmatrix} \quad \left(\text{or} \begin{bmatrix} \Psi_{+} \\ \Psi_{-} \end{bmatrix} \right) \tag{6.1}$$

تُختار المركبتان $\Psi_{1/2}$ و $\Psi_{-1/2}$ اختياراً تُمثل فيه الكمية $|\Psi(\underline{r},t,m_s)|^2 d\tau$ احتمال وجود الجسيم بمركبة z للسبين تساوي $m_s\hbar$ ضمن عنصر حجمي $d\tau$ حول النقطة $\underline{r}$ في اللحظة t . يكافئ الشرط المفروض على اختيار مركبتي التابع الموجي الشرط التالي : يُمثّل

$$\iiint_{\text{الفراغ}} |\Psi(\underline{r},t,m_s)|^2 d\tau \tag{6.2}$$

احتمال كون المركبة z للسبين في اللحظة t تساوي $m_s\hbar$.

اذا غضضنا النظر عن قيمة السبين ، يعطى احتمال وجود الجسيم في اللحظة t في عنصر حجمي $d\tau$ حول النقطة $\underline{r}$ بالعلاقة التالية :

$$\sum_{m_s=-1/2}^{m_s=1/2} |\Psi(\underline{r},t,m_s)|^2 d\tau = |\Psi_{1/2}|^2 d\tau + |\Psi_{-1/2}|^2 d\tau \tag{6.3}$$

وبحسب وجهة النظر المألوفة يعطى هذا الاحتمال ب

$$|\Psi(\underline{r},t)|^2 d\tau \qquad (6.4)$$

بمقارنة (6.4) مع (6.3) نجد أن :

$$|\Psi(\underline{r},t)|^2 = |\Psi_{1/2}|^2 + |\Psi_{-1/2}|^2 \qquad (6.5)$$

أما احتمال وجود الجسيم في نقطة ما من الفراغ دون النظر الى سبينه فهو واحد حتما

$$\iiint \{|\Psi_{1/2}|^2 + |\Psi_{-1/2}|^2\} d\tau = 1 \qquad (6.6)$$

يقال عن تابع من الشكل (6.1) والمحقق للعلاقة (6.6) انه مستنظم

وفقا للطريقة التي تم بها اختيار مركبتي التابع الموجي ، واذا كان الجسيم في حالة محددة فيها قيمة m_s ولتكن $\frac{1}{2}$ مثلا ، كان احتمال الحصول على القيمة $-\frac{1}{2}\hbar$ معدوما ولذلك تكون المركبة $\Psi_{-1/2}$ معدومة ايضا ، اما المركبة $\Psi_{1/2}$ فيجب ان تساوى $\Psi(\underline{r},t)$ بحسب (6.5) . ويكون اذن التابع الموجي

$$\Psi = \begin{bmatrix} \Psi(\underline{r},t) \\ 0 \end{bmatrix} \qquad (6.7)$$

وكذلك اذا كانت $m_s = -1/2$ كان $\Psi_{1/2} = 0$ و $\Psi_{-1/2} = \Psi(\underline{r},t)$ ، أى

$$\Psi = \begin{bmatrix} 0 \\ \Psi(\underline{r},t) \end{bmatrix} \qquad (6.8)$$

ليكن $\Psi(\underline{r},t)$ التابع الموجي السلمي ولتكن الحالة السبينية للجسيم η :

$$\eta = a_+ \xi_{1/2} + a_- \xi_- = \begin{bmatrix} a_+ \\ a_- \end{bmatrix} \qquad (6.9)$$

نعلم ان $|a_+|^2$ تمثل احتمال ان تكون المركبة z للسبين مساوية الــى $\frac{1}{2}\hbar$ ، وان $|\psi(\underline{r},t)|^2 d\tau$ تمثل احتمال وجود الجسيم في العنصر الحجمي $d\tau$ حـــول النقطة $\underline{r}$ في اللحظة t . فيكون اذ ن احتمال وجود الجسيم في عنصر حجمـــي $d\tau$ حول النقطة $\underline{r}$ في اللحظة t بمركبة z للسبين تساوى $\frac{1}{2}\hbar$ مساويا الـــى جداء الاحتمالين السابقين ، أى أنه يساوى $|a_+|^2|\psi(\underline{r},t)|^2 d\tau$. وبحسب طريقـــة اختيار مركبتي التابع الموجي Ψ نرى أن

$$|\Psi_{1/2}|^2 = |a_+|^2 |\psi(\underline{r},t)|^2 \tag{6.10}$$

وبناء عليـه يكون

$$\Psi_{1/2} = a_+ \psi(\underline{r},t) = \langle \xi_+ | \eta \rangle \psi(\underline{r},t) \tag{6.11}$$

وبطريقة مماثلة نجد أن

$$\Psi_{-1/2} = a_- \psi(\underline{r},t) = \langle \xi_- | \eta \rangle \psi(\underline{r},t) \tag{6.12}$$

وهكذا نرى أن التابع الموجي ذى المركبتين يكتب بالشكل

$$\Psi(\underline{r}, t, m_s) = \psi(\underline{r}, t)\, \eta = \begin{bmatrix} \langle \xi_+ | \eta \rangle \psi(\underline{r},t) \\ \\ \langle \xi_- | \eta \rangle \psi(\underline{r},t) \end{bmatrix} \tag{6.13}$$

ليكن

$$\Psi = \xi\, \psi = \begin{bmatrix} \Psi_{1/2} \\ \\ \Psi_{-1/2} \end{bmatrix} \quad , \quad \Phi \equiv \phi\, \eta = \begin{bmatrix} \Phi_{1/2} \\ \\ \Phi_{-1/2} \end{bmatrix} \tag{6.14}$$

تابعين موجيين . نعمم تعريف الجداء الداخلي لتابعين سلميين $\psi(\underline{r},t)$ و $\phi(\underline{r},t)$ ، ولشعاعين سبينيين $\xi(t)$ و $\eta(t)$ الى سبينورات مـــن الشكل (6.14)، فنضع التعريف التالي الذى يعتبر تمديدا طبيعيا للتعريفيـــن السابقين

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \iiint \Psi^{+} \Phi \, d\tau \tag{6.15}$$

$$= \sum_{m_s} \iiint \Psi^*_{m_s} \Phi_{m_s} \, d\tau$$

$$= \iiint (\Psi^*_{1/2} \Phi_{1/2} + \Psi^*_{-1/2} \Phi_{-1/2}) \, d\tau$$

(يمكن ان نفهم المجموع $\sum_{m_s}$ على أنه تكامل بالنسبة لمتحول m_s يأخذ قيمتين فقط ، وقيمتي التابعين عند هاتين القيمتين هما مركبتيهما) . بحسب التعريف (6.15) يكون نظيم تابع موجي من الشكل (6.14)

$$\|\Psi\|^2 = \iiint \{|\Psi_{1/2}|^2 + |\Psi_{-1/2}|^2\} \, d\tau \quad (6.16)$$

٢ • يتعرض التعديل الثاني الذى ندخله على النظرية الكوانتية البسيطة الى المؤثرات الممثلة لملحوظات فيزيائية . بما ان اشعة الحالة اصبحت اعمدة (2×1) فيجب ان تكون المصفوفات الممثلة للملحوظات الفيزيائية مصفوفات (2×2) عناصرها مؤثرات . من أمثلة هذه المصفوفات الممثلة لملحوظات فيزيائية المصفوفات الممثلة لمركبات السبين ، وعناصرها في هذه الحالة مؤثرات مساوية لثوابت .

تمرين : برهن ان القيمة المتوقعة لـ S_z في لحظة t وعند نقطة $\underline{r}$ عندما تكون الجملة في حالة $\Psi = \psi\xi$ هي

$$\langle \hat{S}_z \rangle = \frac{1}{2}\hbar \frac{|\Psi_{1/2}|^2 - |\Psi_{-1/2}|^2}{\|\Psi\|^2} = \frac{1}{2}\hbar \frac{|a_+|^2 - |a_-|^2}{|a_+|^2 + |a_-|^2} \quad (6.17)$$

حيث إن $\xi = a_+ \xi_+ + a_- \xi_-$.

٧ . تطبيق : اثر الحقل المغناطيسي في سويات الطاقة :

اذا وجدت ذرة الهيدروجين في حقل مغناطيسي خارجي $\underline{B}$ اكتسب الالكترون عزما مغناطيسيا $\underline{M}$ ناتجا عن عزمه الحركي الذاتي $\underline{S}$ ، يرتبط $\underline{M}$ و $\underline{S}$ بالعلاقة

$$\underline{M} = -\frac{e}{m} \underline{S} \quad (7.1)$$

حيث إن m كتلة الالكترون و e- شحنته . (تُظهر القياسات الدقيقة ان ثابت التناسب $-e/m$ يجب ان يزيد بمقدار ٠.٠١ %) ينتج من هذا العزم الحركي الذاتي طاقة كامنة

$$V_s = \frac{e}{m} \underline{B} \cdot \underline{S} \qquad (7.2)$$

باختيار المحور z منطبقا على اتجاه الحقل يكتب مؤثر هاميلتون على الشكل

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} + \frac{eB}{2m} (L_z + 2S_z) \qquad (7.3)$$

وتكون سويات طاقة ذرة الهيدروجين هي حلول المعادلة الخاصة

$$[H + \frac{eB}{2m} (L_z + 2S_z)] \Psi = \mathcal{E} \Psi \qquad (7.4)$$

$$\Rightarrow \mathcal{E}_{n m_\ell m_s} = E_n + \frac{eB}{2m} (m_\ell + 2m_s) \hbar \qquad (7.5)$$

من أجل كل قيمة معطاة لـ ℓ تنقسم كل سوية طاقة E_n (E_n سوية الطاقة باهمال السبين وبغياب الحقل) بسبب تفاعل العزم الحركي المداري والحقل الى ($2\ell+1$) سوية جزئية يقابل كل منها قيمة ممكنة لـ m_ℓ ، وتنقسم كل سوية جزئية الى سويتين بسبب تفاعل السبين والحقل (ويُنقِص التحلل عدد الانقسامات الكلية الى ($2\ell+3$))

$$\left.\begin{aligned} \mathcal{E}_{n m_\ell, 1/2} &= E_n + \frac{eB}{2m} (m_\ell + 1) \hbar \\ \mathcal{E}_{n m_\ell, -1/2} &= E_n + \frac{eB}{2m} (m_\ell - 1) \hbar \end{aligned}\right\} (m_\ell = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell) \qquad (7.6)$$

ملاحظات : بعد ادخال السبين وجدنا ان النظرية الكوانتية تُعدَّل بالاسلوب المذكور في 6§ . بحسب هذه التعديلات يصبح Ψ سبينورذا مركبتين و $\mathcal{H}$ مصفوفة (2×2) . بالقاء نظرة على كيفية الانتقال من (7.4) الى (7.5) نلاحظ أنه قد اجرينا حساب القيم الخاصة للطاقة متجاهلين هذه التعديلات ، لكن آخذين في الحسبان أن قيم $\hat{S}_z$ الخاصة هي $\pm \frac{1}{2} \hbar$.

لنختبر الآن اذا ما كان أخذ هذه التعديلات يؤثر فعلا في النتيجة (7.5) .

بالطبع ان $\hat{S}_z$ هي المصفوفة القطرية $\frac{1}{2}\hbar\,diag[1,-1]$ ، وكذلك يجب ان يكـــون $\hat{H}$ و $\hat{L}_z$ مصفوفتين قطريتين HI_2 و $\hat{L}_z I_2$. اما التابع الموجي فهو من الشكل

$$\Psi = \psi\xi = \begin{pmatrix} a_+\psi \\ a_-\psi \end{pmatrix} \qquad (7.7)$$

ولهذا تأخذ المعادلة (7.4) الشكل التالي :

$$\begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & H \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_+\psi \\ a_-\psi \end{pmatrix} + \frac{eB}{2m}\begin{pmatrix} L_z & 0 \\ 0 & L_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_+\psi \\ a_-\psi \end{pmatrix} + \frac{eB}{2m}\hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_+\psi \\ a_-\psi \end{pmatrix} = \mathcal{E}\begin{pmatrix} a_+\psi \\ a_-\psi \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \{H + \frac{eB}{2m}(L_z+\hbar)\}(a_+\psi) \\ \{H + \frac{eB}{2m}(L_z-\hbar)\}(a_-\psi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{E}(a_+\psi) \\ \mathcal{E}(a_-\psi) \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \{E_n + \frac{eB}{2m}(m_\ell+1)\hbar\}(a_+\psi) \\ \{E_n + \frac{eB}{2m}(m_\ell-1)\hbar\}(a_-\psi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{E}(a_+\psi) \\ \mathcal{E}(a_-\psi) \end{pmatrix}$$

تتحقق المعادلة في احدى حالتين :

(i) عندما $a_+ \neq 0$ و $a_- = 0$ وبذلك يكون لدينا

$$\mathcal{E}_{nm_\ell\,1/2} = E_n + \frac{eB}{2m}(m_\ell+1)\hbar$$

(ii) عندما $a_+ = 0$ و $a_- \neq 0$ وبذلك يكون لدينا

$$\mathcal{E}_{nm_\ell,-1/2} = E_n + \frac{eB}{2m}(m_\ell-1)\hbar$$

أما التابعان الموجيان الموافقان فهما

$$\Psi_{n\ell m_\ell\,1/2} = \begin{bmatrix} \psi_{n\ell m_\ell} \\ 0 \end{bmatrix} \quad , \quad \Psi_{n\ell m\,,-1/2} = \begin{bmatrix} 0 \\ \psi_{n\ell m_\ell} \end{bmatrix}$$

وهذه النتائج تطابق النتائج التي نحصل عليها باهمال التعديلات المذكورة في § 6، لدى حساب الطاقة .

٢ . ليس من الضروري ان يُمثَّل $\hat{\mathcal{H}}$ د وما بمصفوفة قطرية .

٣ . لن نلتزم غالبا بالرموز الدقيقة الناتجة من اعتبارات § 6 ، وسنرمز الى التابع الموجي ذى المركبتين ب Ψ صغيرة فقط . سنرمز ايضا الى المؤثرات الكوانتية بالصورة المعتادة نفسها وسنتعامل واياها بالطريقة ذاتها التي اعتدنا ان نتعامل بها قبل ادخال هذه التعديلات . اما الناحية الواجب تذكرها فهي ان اثر السبين ومركباته في التابع الموجي ψ الذى تأخذه ايضا تابع حالة للسبين هو

$$\hat{S}^2 \psi = \frac{3}{4} \hbar^2 \psi \quad , \quad \hat{S}_z \psi = m_s \hbar \psi$$

§ 8 . العزم الحركي الكلي :

نعرف العزم الحركي الكلي للالكترون بأنه مجموع عزميه الحركيين المدارى والسبيني

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \tag{8.1}$$

ويكافىء هذا القول ان

$$\hat{J}_x = \hat{L}_x + \hat{S}_x \; , \; \hat{J}_y = \hat{L}_y + \hat{S}_y \; , \; \hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z \tag{8.2}$$

وبما ان $\underline{\hat{L}}$ و $\underline{\hat{S}}$ يتعلقان بمتحولات مستقلة مختلفة فهما إذن متآلفان.بالاعتماد على العلاقات التبادلية للعزم الحركي المدارى وللسبين نجد أن العزم الحركي الكلي يحقق هو ايضا علاقات تبادلية مماثلة

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \; , \; [J_y, J_z] = i\hbar J_x \; , \; [J_z, J_x] = i\hbar J_y \tag{8.3}$$

$$[J^2, J_x] = [J^2, J_y] = [J^2, J_z] = 0 \tag{8.4}$$

حيث إن

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2\,\underline{L}\cdot\underline{S} \tag{8.5}$$

من تآلف $\hat{\underline{L}}$ و $\hat{\underline{S}}$ ينتج أن

$$[L^2, J^2] = 0 \quad , \quad [S^2, J^2] = 0$$
$$[L^2, \underline{L}\cdot\underline{S}] = 0 \quad , \quad [S^2, \underline{L}\cdot\underline{S}] = 0 \tag{8.6}$$

من الواضح ان مجموعة الملحوظات $\{\hat{J}^2, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}_z\}$ مجموعة تامة وتتعين جملة توابعها الخاصة الكاملة بالاعداد j و ℓ و s و m_j . (ان $\hat{S}^2$ ثابت ويساوى $s(s+1)\hbar^2$، وهو يتآلف مع كل موثر ، ولذلك يمكن الا ندخله في المجموعة التامة السابقة شريطة ان نعلم سلفا قيمته . في بعض الجمل يكون $s=1$، ومن ثم $\hat{S}^2 = 2\hbar^2$ ، ولهذا فان ادخال S^2 يميز حالة عامة تتطبق على أية جملة) .

بالطريقة نفسها التي اتبعت في ايجاد القيم الخاصة للعزم الحركي ولمركبته $\hat{L}_z$ نجد أن

$$\hat{J}^2 \psi_{jm_j\ell s} = j(j+1)\hbar^2 \psi_{jm_j\ell s} \tag{8.7}$$

$$\hat{J}_z \psi_{jm_j\ell s} = m_j\hbar\, \psi_{jm_j\ell s} \tag{8.8}$$

حيث تتغير m_j بواحد صحيح من قيمة الى اخرى بدءا من $-j$ الى $+j$. وبحسب قواعد جمع العزوم الحركية تأخذ j ايضا قيما تختلف عن بعضها بواحد صحيح مبتدئة من $|\ell-s|$ ومنتهية ب ($\ell+s$)

$$|\ell-s| \leq j \leq \ell+s \tag{8.9}$$

ولكن بما ان ℓ يأخذ قيما صحيحة غير سالبة ويأخذ s قيمة وحيدة تساوى $1/2$ لذلك نرى أن j يأخذ قيمتين فقط

$$j_+ = \ell + \frac{1}{2} \quad , \quad j_- = \ell - \frac{1}{2} \qquad (\ell \neq 0) \tag{8.10}$$

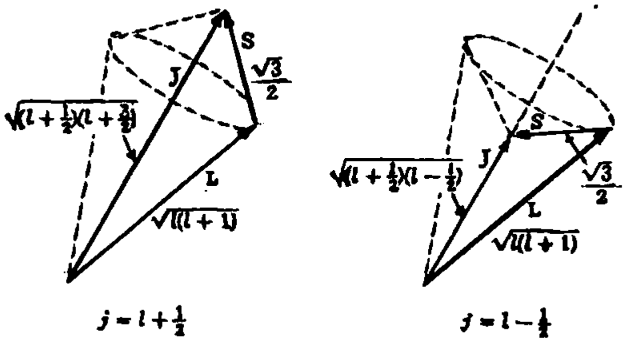
اما من أجل $\ell = 0$ فيأخذ j قيمة وحيدة هي $+1/2$.

يظهر (ش . 3) ان سبين الالكترون يمكن ان يأخذ اتجاهين فقط بالنسبة الى العزم الحركي المداري . ويمكن المرء ان يتصور ان السبين يتجه اما " مسايرا "

للعزم الحركي الكلي أو "معاكسا "اياه" وبما ان الاتجاهات الممكنة ل $\hat{L}$ بالنسبة الى منحى معين هي $(2\ell+1)$ اتجاها، اذن فالاتجاهات الممكنة للعزم الحركي الكلي $\hat{J}$ هي $(2J_{+}+1)+(2J_{-}+1)=2(2\ell+1)$ اتجاها بالنسبة الى منحني ما في الفراغ.

توضع قيمة j كدليل سفلي الى جوار الحرف الذى يرمز الى العزم الحركي المداري ، ويُرمَز الى حالات الذرة المتعلقة بالعزم الحركي المدارى وبالسبين كما في الجدول التالي :

ℓ	0	1		2		3	
j	1/2	1/2	3/2	3/2	5/2	5/2	7/2
	$S_{1/2}$	$P_{1/2}$	$P_{3/2}$	$d_{3/2}$	$d_{5/2}$	$f_{5/2}$	$f_{7/2}$



(ش . ٣)

§ ٩. مبدأ باولي التجريبي

في الوضع الطبيعي لذرة الهيدروجين يكون الالكترون في حالته الدنيا ، فما الوضع الطبيعي للذرات الأكثر تعقيدا ؟ هل يمكن الكترونات ذرة اليورانيوم (Z = 92) كافة ان توجد في حالة واحدة وهل يمكن تصورها وكأنها تدور في مدار بور وحيد يزدحم بها . ان شواهد كثيرة تجعل هذه الفرضية غير محتملة . أحد هذه الشواهد

الفروق الهائلة في سلوك العناصر الكيماوية التي يختلف بنيانها عن بعضها بالكترون واحد فقط ، وعلى سبيل المثال نذكر أن العناصر ذات الاعداد الذرية 9 و 10 و 11 هي على الترتيب غاز الفلور الهالوجيني وغاز النيون الخامل ومعدن الصوديوم القلوي . حيث ان البنيان الالكتروني للذرة يتحكم في تفاعلاتها والذرات الأخرى فمن الصعب أن نفهم لماذا تتغير الخواص الكيماوية للعناصر فجأة لدى وجود تغير طفيف احيانا في اعدادها الذرية اذا كانت كل الالكترونات في الذرة موجودة جميعا في الحالة الكوانتية نفسها .

في عام/ 1925 / اكتشف باولي مبدأ اساسيا يحكم توزع الالكترونات في الذرات التي لها أكثر من الكترون . ينص مبدأ باولي او مبدأ الاستبعاد على أنه لا يمكن أن يوجد الكترونان في الذرة في الحالة الكوانتية نفسها ، بل يجب ان يكون لكل الكترون في الذرة مجموعة تختلف من الاعداد الكوانتية n و ℓ و m_ℓ و m_s ، وقد توصل باولي الى مبدئه من دراسة الطيوف الذرية ، فمن الممكن تعيين الحالات المختلفة للذرة من طيوفها، ومن ثم استنتاج الأعداد الكوانتية الموافقة لهذه الحالات . في طيوف جميع العناصر الا الهيدروجين يلاحظ فقدان عدد من الخطوط الطيفية وهي توافق انتقالات من حالات مقابلة لبعض القيم للأعداد الكوانتية او اليها ، فمثلا لا يلاحظ في الهيليوم انتقالات من أو الى الحالة الدنيا التي يكون فيها سبينا الالكترونين متفقين في الاتجاه ليعطيا سبينا حاصلا قيمته 1 ، على حين يلاحظ وجود انتقالات من الحالات الدنيا التي يكون فيها اتجاها سبيني الالكترونين مختلفين ، او اليها ، لينتجا سبينا حاصلا قيمته صفر . في الحالة المفقودة تكون الاعداد الكوانتية للالكترونين $n=1$ و $\ell=0$ و $m_\ell=0$ و $m_s=1/2$ ، بينما في الحالة التي توجد فعلا يقابل احد الالكترونين $m_s=1/2$ ويقابل الآخر $m_s=-1/2$. اظهر باولي ان كل حالة ذرية غير ملحوظة تجريبيا توافق الكترونين أو اكثر لهما اعداد كوانتية متطابقة وقد جاء بمبدأ الاستبعاد تعبيرا عن هذا الكشف التجريبي .

١٠٥ . مبدأ لا تمايز الجسيمات المتطابقة :

في الميكانيك الكلاسيكي تحتفظ الجسيمات المتطابقة (الالكترونات مثلا)

باستقلاليتها او هويتها برغم تطابق خواصها الفيزيائية ، لأنه وفقا للتصور الكلاسيكي يمكن ان نلحق دليلا 1 بجسم ما ودليلا 2 بجسم آخر مطابق للأول ، وبحسب هذا يمكن القول في كل لحظة t ان الجسم 1 في النقطة $\underline{r}_1(t)$ والجسم 2 في النقطة $\underline{r}_2(t)$ ، وبذلك يمكن ان نتابع الجسمين في حركتيهما على مساريهما ومن ثم تمييز هوية كل جسيم في كل لحظة .

تختلف الوضعية من الوجهة الكوانتية جذريا عما هي عليه في المكيانيك الكلاسيكي لأن مبدأ الارتياب يفرغ مفهوم المسار من معناه ، واذا كان موضع الالكترون معينا تماما في لحظة ما فليس لاحداثياته في لحظة لاحقة قيما معينة حتى وان كانت هذه اللحظة قريبة جدا من اللحظة الأولى . ينتج من هذا أنه اذا عيّنا مواضع جميع الالكترونات في لحظة ما فاننا لا نستطيع ان نحرز تقدما في تعيين هوياتها في لحظة لاحقة ، واذا عيّنا في لحظة لاحقة موضع احد الالكترونات عند نقطة من الفراغ فلا يمكن معرفة أى الالكترونات قد وصل الى هذه النقطة .

ليس ثمة إذن امكانية في ميكانيك الكم من ملاحظة عدد من الالكترونات كل على حدة وتمييزها تبعا لذلك ، وبذلك نقول أن الجسيمات المتطابقة تفقد ذاتيتها (أو استقلاليتها) في ميكانيك الكم . يقود اذن تطابق الجسيمات بالنسبة الى خواصها الفيزيائية الى عدم تمييز كامل بينها وهي نتيجة فائقة الاهمية .

ان مبدأ " لا تمايز الجسيمات المتطابقة " يسهم اسهاما اساسيا في دراسة الجمل المركبة من جسيمات متطابقة . لنبدأ باعتبار جملة تتألف فقط من جسيمين متطابقين وبسبب التطابق يجب أن تكون حالات الجملة الناتجة من مبادلة الجسيمين فيما بينهما متكافئة فيزيائيا ، وهذا يعني ان نتيجة هذه المبادلة وعلى الاكثر هي تغيير طور التابع الموجي ، أى ضربه بعامل قدره $e^{i\theta}$ ، حيث ان θ حقيقي . ليكن $\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$ التابع الموجي للجملة حيث يدل $\underline{r}_1$ و $\underline{r}_2$ على موضعي الجسيمين وسبينيهما ، فنجد

$$\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = e^{i\theta}\, \Psi(\underline{r}_2, \underline{r}_1) \qquad (١٠٠١)$$

باجراء عملية المبادلة مرة اخرى نعود بالجملة الى حالتها الاصلية ، ومن ناحية ثانية يتغير التابع الموجي بطور $e^{2i\theta}$:

$$\Psi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) = e^{2i\theta}\,\Psi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) \qquad (10.2)$$

ينتج من هذا ان $e^{2i\theta} = 1$ او $e^{i\theta} = \pm 1$ ، اذن

$$\Psi(\underline{r}_1,\underline{r}_2) = \pm\Psi(\underline{r}_2,\underline{r}_1) \qquad (10.3)$$

تدل العلاقة السابقة على وجود امكانيتين : فاما ان يكون التابع الموجي للجملة متناظرا (لا يتغير عندما يبادل ما بين الجسيمين) واما ضد متناظر (يغير اشارته لدى مبادلة الجسيمين) . من الواضح ان جميع التوابع الموجية لكل حالات جملة جسيمات متطابقة يجب ان يكون لها الصفة التناظرية نفسها (اما جميعا متناظرة او اما جميعا ضد متناظرة) والا كانت التوابع الموجية للحالات التي هي تركيب خطي في حالات ذات تناظر مختلف ليست متناظرة وليست ضد متناظرة مما يناقض العلاقة (10.3)

يمكن تعميم النتائج السابقة لجمل تتركب من أى عدد من الجسيمات المتطابقة لأنه اذا كان أى زوج منها يوصف بتوابع حالة متناظرة (او ضد متناظرة) فكذلك يتمتع أى زوج آخر ، وبسبب تطابق الجسيمات ، بنفس الخاصة . ينتج من هذا ان التابع الموجي لجملة جسيمات متطابقة اما الا يتغير عندما نبادل أى زوج من الجسيمات أو ان يغير اشارته عندما نبادل أى زوج منها . نتحدث في الحالة الأولى عن توابع موجية متناظرة وعن توابع موجية ضد متناظرة في الحالة الثانية .

11.5 الاحصاء ومبدأ الاستبعاد :

تعتمد خاصة وصف التوابع الموجية لجملة جسيمات متطابقة بتوابع موجية متناظرة او ضد متناظرة على طبيعة الجسيمات . تسمى الجسيمات التي توصف بتوابع موجية ضد متناظرة جسيمات فيرمي او فيرميونات لأن التوزع الاحصائي لعينة منها يطيع توزع فيرمي ـ ديراك . من أمثلة هذه الجسيمات الالكترونات والنيوترونات والبروتونات والبوزيترونات. تسمى الجسيمات التي توصف بتوابع موجية متناظرة بوزونات لأنها

تطيع في توزعهـا الاحصائي توزع بوزه - اينشتين ، ومن امثلتها النيوترونات وجسيمات α وذرات الهيليوم .

يُظهر ميكانيك الكم النسبوى ان الاحصاء الذى تطيعه الجسيمات يتعلق فقط بسبين الجسيمات ، فتلك ذات السبين المساوى لنصف عدد تام ($1/2$ او $3/2$ او ...) هي فيرميونات ، وتلك ذات السبين المساوى لعدد تام (0 او 1 او 2 او ...) هي بوزونات .

يتعين الاحصاء الذى تخضع له جسيمات مركبة (كالذرات او النوى مثلا) عن طريق مكوناتها الاساسية ، اذ يكافئ مبادلة جسيمين مركبين فيمابينهما مبادلة بضعة ازواج بين الجسيمات الأولية المتطابقة ونحن نعلم ان مبادلة بوزونين فيما بينهما لا تغير التابع الموجي ، بينما تؤدى عملية مبادلة فيرميونين الى تغيير اشارة التابع الموجي . لهذا تطيع الجسيمات المركبة الحاوية عددا زوجيا من الفيرميونات احصاء بوزه - اينشتين بينما تطيع تلك الحاوية عددا فرديا من الفيرميونات احصاء فيرمي . تتفق هذه النتيجة والقاعدة المذكورة في الفقرة السابقة لأن سبين الجسيم المركب يساوى عددا تاما او نصف عدد تام تبعا لكون عدد الفيرميونات الداخلة في تركيبه زوجيا او فرديا .

تطيع نوى الذرات ذات الوزن الذرى الفردى (تحوى عددا فرديا من البروتونات والنيوترونات) احصاء فيرمي بينما تطيع تلك ذات الوزن الذرى الزوجي احصاء بوزه - اينشتين . أما الذرات التي تضم الالكترونات والنوى فيتعين الاحصاء الذي تخضع له بالفرق بين الوزن الذرى والعدد الذرى $N = A - Z$ فهي فيرميونات اذا كان عدد نيوترونات نواتها فرديا وبوزونات اذا كان زوجيا .

لنفرض وجود جملة موءلفة من N جسيما متطابقا يمكن اهمال التفاعل فيما بينها وليكن ψ_1 و ψ_2 و ψ_3 و . . . . التوابع الموجية لمختلف الحالات الخاصة التي يمكن ان يأخذها اى جسيم من هذه الجسيمات وحده . تتعين حالة الجملة ككل بتعيين الحالة التي يشغلها كل جسيم على حدة . المسألة الآن هي كيف يتم انشاء التابع

الموجي Ψ للجملة ككل بدءاً من التوابع الموجية ψ_1 و ψ_2 و . . . . ليكن p_1 و p_2 و . . . و p_N ارقام الحالات المشغولة بال N جسيماً (يمكن ان يتساوى رقمان او اكثر ، أي يمكن ان يكون جسيمان او اكثر في الحالة نفسها) ، يعطى التابع الموجي لجملة بوزونات بمجموع حدود من الشكل

$$\psi_{p_1} \psi_{p_2} \cdots \psi_{p_N} \tag{11.1}$$

حيث يمتد المجموع على جميع التبديلات الممكنة للاعداد ($p_1, p_2, \ldots, p_N$). عندما يكون $p_1 \neq p_2$ يكون الشكل المستنظم للتابع الموجي لجملة بوزونين احدهما في الحالة $\psi_{p_1}(\underline{r})$ والآخر في الحالة ($\underline{r}$) ψ_{p_2} معطى بالعلاقة

$$\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{p_1}(\underline{r}_1)\psi_{p_2}(\underline{r}_2) + \psi_{p_2}(\underline{r}_1)\psi_{p_1}(\underline{r}_2)\right] \tag{11.2}$$

وذلك بفرض ان ψ_{p_1} و ψ_{p_2} مستعمد ان مستنظمان. اذا كانت التوابع ψ_1 و ψ_2 و ψ_3 و . . . مستعمدة ومستنظمة فمن السهل تعميم (11.2) الى جملة مؤلفة من N بوزونا :

$$\Psi(\underline{r}_1, \ldots, \underline{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum \psi_{p_1}(\underline{r}_1)\psi_{p_2}(\underline{r}_2)\cdots\psi_{p_N}(\underline{r}_N) \tag{11.3}$$

حيث يمتد المجموع على كافة تبديلات ($p_1, p_2, \ldots, p_N$) .

تمرين : برهن صحة العلاقتين (11.2) و (11.3) .

من اجل جملة فيرميونات يكون التابع الموجي ضد متناظر ويمكن ان يكتب على شكل معين

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \psi_{p_1}(\underline{r}_1) & \psi_{p_1}(\underline{r}_2) & \cdots & \psi_{p_1}(\underline{r}_N) \\ \psi_{p_2}(\underline{r}_1) & \psi_{p_2}(\underline{r}_2) & \cdots & \psi_{p_2}(\underline{r}_N) \\ \cdots & \cdots & & \cdots \\ \psi_{p_N}(\underline{r}_1) & \psi_{p_N}(\underline{r}_2) & \cdots & \psi_{p_N}(\underline{r}_N) \end{vmatrix} \tag{11.4}$$

من الواضح ان مبادلة جسيمين تكافيء المبادلة بين عمودين مما يؤدي الى تغير اشارة المعين اي تغير اشارة Ψ . من اجل جملة مؤلفة من فيرميونين يكون

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{p_1}(\underline{r}_1)\, \psi_{p_2}(\underline{r}_2) - \psi_{p_2}(\underline{r}_1)\, \psi_{p_1}(\underline{r}_2) \right] \tag{11.5}$$

وهي نتيجة مباشرة لـ (11.4) . نلاحظ الان أنه اذا تساوى عددان من الاعداد p_1 و p_2 و p_3 و . . . فانه يتساوى سطران في المعين مما يؤدي الى انعدامه . ينتج من هذا ان المعين (2.4) ، ومن ثم Ψ ، يختلف عن الصفر فقط لما تختلف الاعداد p_1 و p_2 و p_3 . . . عن بعضها . نستنتج اذن انه اذا تألفت جملة من فيرميونات متطابقة فانه لا يمكن جسيمين ان يشغلا الحالة الكوانتية نفسها في الوقت نفسه ، وهو مبدأ الاستبعاد او مبدأ باولي .

تمرين : برهن على أن التابع الموجي لجملة فيرميونات يمكن ان يكتب بالشكل

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i} \begin{bmatrix} 1 & 2 & \cdots & N \\ i_1 & i_2 & \cdots & i_N \end{bmatrix} \psi_{p_{i_1}}(\underline{r}_1)\, \psi_{p_{i_2}}(\underline{r}_2) \cdots \psi_{p_{i_N}}(\underline{r}_N) \tag{11.6}$$

حيث يمتد المجموع السابق على جميع متبادلات الاعداد ($1\ 2\ \ldots\ N$) وحيث ان

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & \cdots & N \\ i_1 & i_2 & \cdots & i_N \end{bmatrix}$$

تساوي $+1$ اذا كان عدد الانقلابات زوجيا و -1 اذا كان عدد الانقلابات فرديا .

ننوه هنا بأنه يمكن ان تُفهم في الحالة الكلاسيكية الحالات المختلفة ψ_{p_i} وكأنها تحدد مسارات مختلفة للجسيمات ، ويمثل كل حد (11.1) حالة متميزة كلاسيكيا .

تعرف هذه الطريقة في تعداد الحالات المختلفة بالاحصاء الكلاسيكي او احصاء بولتزمان .

ينتج من الطرائق المختلفة في احصاء الحالات المتمايزة للجمل ذات العدد الكبير من الجسيمات نتائج مهمة في الميكانيك الاحصائي . نوضح هذه العبارة بمثال نفترض فيه ابسط الجمل الممكنة ، أى تلك المؤلفة من جسيمين يمكن كل واحد منهما ان يشغل احدى الحالتين التاليتين ψ_α او ψ_β ونضع فيما يلي الحالات المتمايزة وفقا لكل نوع من الاحصاء .

الاحصاء الكلاسيكي :

$$\begin{matrix} \psi_\alpha(\underline{r}_1)\,\psi_\alpha(\underline{r}_2) \\ \psi_\alpha(\underline{r}_1)\,\psi_\beta(\underline{r}_2) \\ \psi_\beta(\underline{r}_1)\,\psi_\alpha(\underline{r}_2) \\ \psi_\beta(\underline{r}_1)\,\psi_\beta(\underline{r}_2) \end{matrix}$$

(4 حالات)

احصاء فيرمي :

$$\psi_\alpha(\underline{r}_1)\,\psi_\beta(\underline{r}_2) - \psi_\beta(\underline{r}_1)\,\psi_\alpha(\underline{r}_2)$$

(حالة واحدة)

احصاء بوزه :

$$\begin{matrix} \psi_\alpha(\underline{r}_1)\,\psi_\alpha(\underline{r}_2) \\ \psi_\alpha(\underline{r}_1)\,\psi_\beta(\underline{r}_2) + \psi_\beta(\underline{r}_1)\,\psi_\alpha(\underline{r}_2) \\ \psi_\beta(\underline{r}_1)\,\psi_\beta(\underline{r}_2)\;. \end{matrix}$$

(3 حالات)

في درجات الحرارة العالية تصبح جميع الحالات الموافقة لكل نمط احصائي معين متساوية الاحتمال . وفق احصاء فيرمي يستحيل على الجسيمين ان يشغلا الحالة نفسها (مبدأ الاستبعاد)، وبحسب احصاء بوزه يكون احتمال وجود الجسيمين في الحالة نفسها مساويا $\frac{2}{3}$ ويساوى $\frac{1}{2}$ بحسب الاحصاء الكلاسيكي . اذن فعلى حين

يمنع احصاء فيرمي الجسيمات من الوجود في الحالة نفسها وبعبارة غير دقيقة يبقيها منفصلة عن بعضها بعضا ، فان احصاء بوزة يزيد من احتمال وجود الجسيمات مع بعضها بعضا بالمقارنة مع الحالة الكلاسيكية .

§ 12. التشكيلات الالكترونية وقواعد هاند

تكون جملة جسيمات مستقرة عندما تكون طاقتها الكلية اصغرية . في الذرات المتعددة الالكترونات يمنع مبدأ الاستبعاد الالكترونات من أن تشغل جميعا الحالة الدنيا . قبل أن ندرس كيف تحدد القاعدتان السابقتان البناء الالكتروني للذرات المعقدة نناقش اولا تغير طاقة الالكترون تبعا لحالته . على حين تتفاعل جميع الكترونات الذرة فيما بينها ، كما يدل على ذلك مبدأ باولي الذى يحكم سلوكها فانه يمكن ان نفترض بتقريب لا بأس به ان كل الكترون موجود في حقل قوى وسطي ثابت. من اجل الكترون معطى يساوى هذا الحقل الكهربائي للنواة يخفضّه الحجب الجزئي للالكترونات الاخرى الاقرب الى النواة. تلك الالكترونات التي لها العدد الكوانتي n نفسه طاقات متقاربة ومن المصطلح أن يقال أن هذه الالكترونات تشغل الطبقة نفسها (او القشرة) وقد كنا رمزنا اليها بحروف رومانية كبيرة

$n =$	1	2	3	4	5
	K	L	M	N	O

تتعلق طاقة الالكترون في طبقة معينة والى حد ما بالعدد الكمي المدارى ℓ لكن بصورة اضعف من تعلقها بـ n وتزداد طاقة الالكترون في كل طبقة بازدياد ℓ . نقول عن الكترونات طبقة معينة n التي تشترك بالقيمة ℓ نفسها انها تشغل طبقة جزئية واحدة (أو قشرة جزئية واحدة) . يضع مبدأ الاستبعاد حدا صارما على عدد الالكترونات التي يمكن ان تشغل طبقة جزئية معينة (n,ℓ) ، فمن اجل قيمة معينة لـ ℓ تواجد $2\ell+1$ قيمة مختلفة لـ m_ℓ يقابل كلا منها قيمتان مختلفتان للعدد السبيني المغناطيسي m_s . ينتج من هذا ان كل طبقة جزئية (n,ℓ) تحتوى على $2(2\ell+1)$ الكترونا ، وتحتوى كل طبقة n على

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} 2(2\ell+1) = 2n^2 \qquad (12.1)$$

الكترونـا .

يعبر عن انشغال مختلف الطبقات الجزئية بمساعدة مصطلح أُدخل من قبل في الحقل المركزى ، فيعبر عن كل طبقة جزئية بالعدد الكمي الرئيسي n الذى يدل على الطبقة ، يتبعه حرف يدل على العزم الحركي المدارى ℓ مع دليل علوى يعين عدد الكترونات الطبقة الجزئية. يكتب مثلاالتشكيل الالكتروني للصوديوم كما يلي

$$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1 \qquad (12.2)$$

وتبين هذه العبارة ان كلتا الطبقتين الجزئيتين $1s$ $(n=1\ ,\ \ell=0)$ و $2s$ $(n=2, \ell=0)$ تحتوى على الكترونين ، وأن الطبقة الجزئية $2p$ $(n=2, \ell=1)$ تحتوى على ستة الكترونات ، والطبقة الجزئية $3s$ $(n=3\ ,\ \ell=0)$ على الكترون واحد . اماالتشكيل الالكتروني للالومنيوم فهو

$$1s^2\, 2s^2\, 2p^6\ 3s^2\ 3p^1 .$$

عندما تأخذ طبقة جزئية سعتها الكاملة نقول عنها انها مغلقة او ممتلئة، ومثلا يشغل الطبقة الجزئية المغلقة s الكترونان والطبقة الجزئية المغلقة p ستة الكترونات والطبقة الجزئية المغلقة d عشرة الكترونات وهكذا . . . .

بما ان تعلق طاقة الكترون بـ m_ℓ و m_s صغير نسبيا،لذلك تملك جميع الكترونات طبقة جزئية نفس الطاقة تقريبا . لسوء الحظ ليس ثمة قاعدة عامة تعطي تعلق طاقة الكترون بالاعداد الكوانتية n و ℓ و m_ℓ و m_s ولتعين من ثم ترتيب انشغال الطبقات الجزئية. اذا صرفنا النظر عن عدد من الحالات الشاذة فان الطبقات الجزئية تشغل حسب الترتيب

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 6d \qquad (12.2)$$

من اجل الذرات غير الثقيلة تتعين الحالات التي تشغلها الالكترونات في الطبقات الجزئية بالاعتماد على التزاوج السبيني المدارى (LS) وقواعد هاند .

بحسب التزاوج (LS) أو ما يعرف بطريقة رَسِل ـ سا ندرز ، وعند ما يسهم اكثر من الكترونين في العزمين الحركيين المداري والسبيني ، تجمع جميع العزوم الحركية المدارية $\hat{L}_i$ في عزم حاصل $\hat{L} = \sum_i \hat{L}_i$ ، وتجمع العزوم السبينية $\hat{S}_i$ كلها في عزم حاصل $\hat{S} = \sum \hat{S}_i$ وبعدها يتفاعل العزمان الحاصلان $\hat{L}$ و $\hat{S}$ بسبب التفاعل السبيني المداري ليعطيا عزما حاصلا كليا $\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$. اما طريقة معرفة العزوم الحاصلة فقد نوقشت في الفصل VIII . واذا رمزنا الى الاعداد الكوانتية المتعلقة بالعزوم الحاصلة بالرموز ℓ و m_ℓ و s و m_s و j و m_j كان لدينا

$$
\begin{aligned}
L^2 &= \ell(\ell+1)\hbar^2 & L_z &= m_\ell \hbar \\
S^2 &= s(s+1)\hbar^2 & S_z &= m_s \hbar \\
J^2 &= j(j+1)\hbar^2 & J_z &= m_j \hbar
\end{aligned}
\qquad (12.3)
$$

تحقق الالكترونات لدى شغلها لمختلف الحالات الجزئية ، الى درجة عالية من الدقة قواعد هاند ، وهي تعين حالة الجملة بشكل تكون طاقتها اصغرية ، وتتلخص هذه القواعد فيما يلي :

١) تتجه السبينات $\hat{S}_i$ حيث يكون لها سبين حاصل اعظمي $\hat{S}$ وحيث لا يختل مبدأ الاستبعاد . ولهذا تتجه ثلاثة الكترونات $2p$ لتعطي سبينا حاصلا معينا بالعدد السبيني $s = 3/2$ ، واذا وجد الكترون رابع وجب عليه لئلا يخل بمبدأ الاستبعاد ان يتجه باتجاه معاكس يكون $s = \frac{3}{2} - \frac{1}{2} = 1$ ، ومن أجل الالكترونات الستة $2p$ يكون $s = \frac{3}{2} - \frac{3}{2} = 0$.

٢) تتجه العزوم الحركية $\hat{L}_i$ لتعطي قيمة عظمى للعزم الحاصل $\hat{L}$ وبما يتفق ومبدأ الاستبعاد والقاعدة (١) . فمثلا يكون $\ell = 1+0 = 1$ من أجل الكترونين $2p$ و $\ell = 1+0-1 = 0$ من أجل ثلاثة الكترونات $2p$ و $\ell = 1+0-1+1$ من اجل أربعة الكترونات $2p$ و $\ell = 1+0-1+1+0-1$ من أجل ستة الكترونات $2p$.

٣) يساوي j ، العدد الكمي الكلي ، $|\ell - s|$ عندما يكون اقل من نصف الطبقة الجزئية ممتلئا ويساوي $\ell + s$ عندما يكون أكثر من نصفها ممتلئا . وكمثال

على القاعدة (3) نذكر الشاردة Pr^{+++} :

$$^{59}Pr^{+++} : M\, 4s^2\, 4p^6\, 4d^{10}\, 4f^2\, 5s^2\, 5p^6$$

حيث يدل M على أن الطبقة M والطبقات السابقة لها ممتلئة تماما . (لاحظ أن التشكيل الالكتروني لـ Pr هو

$$Pr^{59} : M\, 4s^2\, 4p^6\, 4d^{10}\, 4f^3\, 5s^2\, 5p^6\, 6s^2$$

وأن الكترونين $6s^2$ يتشردان اولا ويليهما الكترون $4f$ وذلك بحسب (12،2).الان وبحسب القاعدة (١) يتحد سبينا الالكترونين $4f$ لينتجا $s=1$، وحسب مبدأ باولي لا يمكن ان يكون $m_{1\ell} = m_{2\ell} = 3$ ، بل $m_{1\ell} = 3$ و $m_{2\ell} = 2$ (والعكس صحيح) وبذلك يكون $\ell = 5$ و $j = |\ell - s| = 4$.

مثال : سنعتبر في الجدول التالي مجموعة من الشوارد كل طبقاتها الجزئية ممتلئة الا الطبقة $3d$. يرمز N الى عدد الالكترونات في الطبقة الجزئية $3d$ و m الى العدد الكمي المغناطيسي للالكترون . ويبين الجدول القيم الناتجة بحسب قواعد هاند لـ s و ℓ و j ، وتظهر الأسهم اتجاه السبين .

	Ti	V^{3+}	Cr^{3+}	Cr^{2+}	Fe^{3+} Mn^{2+}	Fe^{2+}	Co^{2+}	Ni^{2+}	Cu^{2+}	Cu^{+}
m \ N	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
2	↑	↑	↑	↑	↑	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
1		↑	↑	↑	↑	↑	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
0			↑	↑	↑	↑	↑	↑↓	↑↓	↑↓
−1				↑	↑	↑	↑	↑	↑↓	↑↓
−2					↑	↑	↑	↑	↑	↑↓
s	1/2	1	3/2	2	5/2	2	3/2	1	1/2	0
l	2	3	3	2	0	2	3	3	2	0
j	3/2	2	3/2	0	5/2	4	9/2	4	5/2	0

تمرين : برهن على أنه من أجل أى طبقة جزئية مغلقة يكون لدينا

$$S = 0 \quad \ell = 0 \quad j = 0$$

تمرين : برهن على أنه من أجل أى طبقة جزئية (n, ℓ) نصف ممتلئة يكون لدينا

$$S = \frac{1}{2} N \quad , \ell = 0 \quad , j = S$$

حيث يرمز N الى عدد الالكترونات فيها .

نلاحظ ختاما ان نظام رسل ساندرز في تزاوج (LS) يخفق من أجل الذرات الثقيلة وعندئذ تجمع العزوم المدارية المفردة $\hat{\underline{L}}_i$ والعزوم السبينية الموافقة $\hat{\underline{S}}_i$ لتنتج عزما حاصلا

$$\hat{\underline{J}}_i = \hat{\underline{L}}_i + \hat{\underline{S}}_i$$

يتعلق بالالكترون i . تجمع بعدئذ العزوم الحاصلة المفردة $\hat{\underline{J}}_i$ لتنتج عزما حاصلا كليا

$$\hat{\underline{J}} = \sum_i \hat{\underline{J}}_i$$

يدعى هذا النظام تزاوج (jj) ، ولن نفصل أكثر بل سنرجع القارىء الى [11] .

13 §. الجدول الدورى

عندما ترتب العناصر الكيمياوية وفقا لعددها الذرى يلاحظ أن العناصر ذات الخواص الكيماوية المتشابهة تتعاقب في ادوار متساوية. تسمى هذه الملاحظة التجريبية القانون الدورى وقد صاغها العالم الروسي ديمترى مندليف في القرن الماضي (قام مندليف بترتيب العناصر بحسب اوزانها الذرية) ، ويسمى الترتيب المجدول الذى يظهر هذا القانون الدورى ، الجدول الدورى .

تؤلف العناصر ذات الخواص المتشابهة زمرا تقع في اعمدة شاقولية. تتألف الزمرة I من الهيدروجين والمعادن القلوية وهي جميعا فعالة كيماويا وتكافوء كل

منها يساوي +١ . تتالف الزمرة VII من الهالوجينات وهي عناصر لا معدنية سريعة التطاير فعّالة كيماويا وتكافوءاتها -١ ، وتوءلف جزئيات ثنائية الذرة في الحالة الغازية . تتألف الزمرة VIII من الغازات الخاملة وهي عناصر خاملة لدرجة انها لا توءلف مركبات مع العناصر الاُخرى فحسب بل لا توءلف ذراتها جزئيات كما هي الحال في الغازات الاُخرى .

تسمى الصفوف الاُفقية ادوارا ، وعبر كل دور يوجد انتقال مطرد من معدن قوى الفعالية الى معادن أقل فعالية فمعادن ضعيفة الفعالية الى لا معادن شديدة الفعالية وختاما الى غاز خامل . يوجد ايضا في كل عمود تغير منتظم في الخواص ولكنه أقل وضوحا مما هو عليه في الادوار، فمثلا ترافق زيادة العدد الذرى في المعادن القلوية زيادة في الفعالية الكيماوية ولكن العكس صحيح في الهالوجينات.

تَظهر في كل دور وبعد العنصر الثالث فيه (أى بين الزمرتين II و III) سلسلة من العناصر الانتقالية وهي معادن ذات شَبَه كيماوى كبير فيما بينها ولكن شبهها بعناصر الزمر ضئيلا . يظهر في الدور السادس وبعد ١٤ من العنصر الثالث فيه خمسة عشر عنصرا انتقاليا متجاورا من أصل العناصر الانتقالية الفاصلة بين الزمرتين II و III يصعب تمييز خواصها وتسمى العناصر الترابية. تظهر مجموعة مماثلة من العناصر في الدور السابع وتسمى زمرة الاُكتنان .

يقدم مفهوم الطبقات والطبقات الجزئية التي نوقشت في البند السابق تفسيرا كاملا للجدول الدورى الذى ليس سوى مرآة تنعكس فيها البنى الذرية للعناصر. سنستعرض هنا تفسيرات وصفية للخواص العامة لبعض عناصر الجدول الدورى وزمره وسيجد القارىء تفسيرات مفصلة ودقيقة في بعض مقررات الفيزياء والكيمياء .

الجدول الدورى مع الأشكال الخارجيـــة
للذرات المحايدة في حالتها الدنيا

H^{1} $1s$																	He^{2} $1s^2$
Li^{3} $2s$	Be^{4} $2s^2$											B^{5} $2s^22p$	C^{6} $2s^22p^2$	N^{7} $2s^22p^3$	O^{8} $2s^22p^4$	F^{9} $2s^22p^5$	Ne^{10} $2s^22p^6$
Na^{11} $3s$	Mg^{12} $3s^2$											Al^{13} $3s^23p$	Si^{14} $3s^23p^2$	P^{15} $3s^23p^3$	S^{16} $3s^23p^4$	Cl^{17} $3s^23p^5$	Ar^{18} $3s^23p^6$
K^{19} $4s$	Ca^{20} $4s^2$	Sc^{21} $3d$ $4s^2$	Ti^{22} $3d^2$ $4s^2$	V^{23} $3d^3$ $4s^2$	Cr^{24} $3d^5$ $4s$	Mn^{25} $3d^5$ $4s^2$	Fe^{26} $3d^6$ $4s^2$	Co^{27} $3d^7$ $4s^2$	Ni^{28} $3d^8$ $4s^2$	Cu^{29} $3d^{10}$ $4s$	Zn^{30} $3d^{10}$ $4s^2$	Ga^{31} $4s^24p$	Ge^{32} $4s^24p^2$	As^{33} $4s^24p^3$	Se^{34} $4s^24p^4$	Br^{35} $4s^24p^5$	Kr^{36} $4s^24p^6$
Rb^{37} $5s$	Sr^{38} $5s^2$	Y^{39} $4d$ $5s^2$	Zr^{40} $4d^2$ $5s^2$	Nb^{41} $4d^4$ $5s$	Mo^{42} $4d^5$ $5s$	Tc^{43} $4d^6$ $5s$	Ru^{44} $4d^7$ $5s$	Rh^{45} $4d^8$ $5s$	Pd^{46} $4d^{10}$ –	Ag^{47} $4d^{10}$ $5s$	Cd^{48} $4d^{10}$ $5s^2$	In^{49} $5s^25p$	Sn^{50} $5s^25p^2$	Sb^{51} $5s^25p^3$	Te^{52} $5s^25p^4$	I^{53} $5s^25p^5$	Xe^{54} $5s^25p^6$
Cs^{55} $6s$	Ba^{56} $6s^2$	La^{57} $5d$ $6s^2$	Hf^{72} $4f^{14}$ $5d^2$ $6s^2$	Ta^{73} $5d^3$ $6s^2$	W^{74} $5d^4$ $6s^2$	Re^{75} $5d^5$ $6s^2$	Os^{76} $5d^6$ $6s^2$	Ir^{77} $5d^9$ –	Pt^{78} $5d^9$ $6s$	Au^{79} $5d^{10}$ $6s$	Hg^{80} $5d^{10}$ $6s^2$	Tl^{81} $6s^26p$	Pb^{82} $6s^26p^2$	Bi^{83} $6s^26p^3$	Po^{84} $6s^26p^4$	At^{85} $6s^26p^5$	Rn^{86} $6s^26p^6$
Fr^{87} $7s$	Ra^{88} $7s^2$	Ac^{89} $6d$ $7s^2$															

Ce^{58} $4f^2$ $6s^2$	Pr^{59} $4f^3$ $6s^2$	Nd^{60} $4f^4$ $6s^2$	Pm^{61} $4f^5$ $6s^2$	Sm^{62} $4f^6$ $6s^2$	Eu^{63} $4f^7$ $6s^2$	Gd^{64} $4f^7$ $5d$ $6s^2$	Tb^{65} $4f^8$ $5d$ $6s^2$	Dy^{66} $4f^{10}$ $6s^2$	Ho^{67} $4f^{11}$ $6s^2$	Er^{68} $4f^{12}$ $6s^2$	Tm^{69} $4f^{13}$ $6s^2$	Yb^{70} $4f^{14}$ $6s^2$	Lu^{71} $4f^{14}$ $5d$ $6s^2$
Th^{90} – $6d^2$ $7s^2$	Pa^{91} $5f^2$ $6d$ $7s^2$	U^{92} $5f^3$ $6d$ $7s^2$	Np^{93} $5f^4$ $7s^2$	Pu^{94} $5f^6$ $7s^2$	Am^{95} $5f^7$ $7s^2$	Cm^{96} $5f^7$ $6d$ $7s^2$	Bk^{97}	Cf^{98}	Es^{99}	Fm^{100}	Md^{101}	No^{102}	Lr^{103}

رأينا ان العزم الحركي المدارى الكلي والعزم السبيني الكلي في طبقة جزئية مغلقة معدومان . وتتصف الكترونات طبقة مغلقة بأنها ذات ارتباط قوى بالذرة لأن الشحنة النووية الموجبة كبيرة بالمقارنة مع شحنة الكترونات الطبقات الداخلية الحاجبة . وحيث ان الذرة الحاوية فقط طبقات ممتلئة ليس لها عزم مزوج مغناطيسي ($J = 0$) فهي لا تجذب الالكترونات الاخرى كما ان الكتروناتها لا تستطيع الانفكاك بسهولة عنها ، مما يجعلنا نتوقع أن تكون عناصر كهذه خاملة كيماويا ومماثلة تماما للغازات الخاملة ، وبالفعل نجد أن كل الغازات الخاملة لها طبقات مغلقة .

أما الذرات ذات الالكترون الوحيد في طبقتها الخارجية فتميل لأن تفقد هذا الالكترون البعيد نسبيا عن النواة والمحجوب بالالكترونات الداخلية الا عن الشحنة النووية الفعالة $+e$. من ضمن هذه الفصيلة الهيدروجين والمعادن القلوية ولذلك فلها تكافوء $+1$. أما الذرات التي ينقصها الكترون حتى تصبح مغلقة فانها تميل الى اكتساب هذا الالكترون عبر الجذب الناشيء عن الشحنة النووية القوية وغير المحجوبة بصورة كاملة مما يفسر السلوك الكيماوى للهالوجينات . وبطرائق مماثلة يمكن تفسير التشابه بين مختلف عناصر الزمر في الجدول الدورى .

تنشأ العناصر الانتقالية من كون الالكترونات s أكثر ارتباطا من الالكترونات d أو f . وأول عنصر يظهر هذا الاثر هو البوتاسيوم الذى يشغل الكترونه الخارجي حالة جزئية $4s$ وليس الحالة الجزئية $3d$ ،والتشكيل الالكتروني للبوتاسيوم هو

$$K^{19}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$$

أما الفرق في طاقة الارتباط بين الالكترونات $3d$ والالكترونات $4s$ فهو ضئيل كما يظهر ذلك في شكلي الكروم Cr^{24} والنحاس Cu^{29}

$$Cr^{24}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$$

$$Cu^{29}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$$

حيث ينضم الى الطبقة الجزئية $3d$ الكترون على حساب شاغر واحد في الطبقة

الجزئية 4s ، ولكن هذا الأمر لا يحدث في النيكل Ni^{28} حيث تطيع الكترونات هذا العنصر قواعد الاستيعاب (12.2) فتمتلىء الطبقة الجزئية 4s قبل امتلاء الطبقة الجزئية 3d ،

$$Ni^{28} : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^8\ 4s^2$$

تعود الخواص المغناطيسية الحديدية للحديد والكوبالت والنيكل الى الامتلاء الجزئي لقشراتها الجزئية 3d التي لا تتجمع الكتروناتها في ازواج متعاكسة السبين مما لا يسمح باختصار سبيناتها مع بعضها وانعدامها ، ففي الحديد مثلا

$$Fe^{26} : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^6\ 4s^2$$

تكون خمسة الكترونات من أصلة الالكترونات 3d الستة متوازية السبينات وبذلك تملك كل ذرة حديد عزما مغناطيسيا حاصلا مرتفعا .

من السهل تفسير التشابه الكبير في خواص عناصر زمرة اللانتان (العناصر الترابية) وزمرة الاوكتان بالاستناد الى ترتيب الامتلاء (3.2) ، وبالفعل تنتهي كل اشكال العناصر الترابية ب $4f^{?}\ 5s^2\ 5p^6\ 6s^2$ ولكنها تختلف بعدد الكترونات الطبقة الجزئية 4f ، ومن الواضح أن انضمام الكترونات الى هذه الطبقة الجزئية لا يتسبب الا في أثر ضئيل جدا في السلوك الكيماوى لهذه العناصر مادام هذا السلوك تحكمه الالكترونات الخارجية . يفسر التشابه في الخواص الكيماوية لزمرة الاوكتان بطريقة مشابهة .

ثمة الكثير من الخواص الفيزيائية والكيميائية التي يمكن استنتاجها من التشكيلات الالكترونية للعناصر ، وقد قدمنا في هذا البند مناقشة عامة موجزة لعدد قليل من هذه الخواص .

***

الفصل الثاني عشر

تفاعل جسيم مشحون وحقل كهرطيسي .

سوف ندرس في هذا الفصل مسألة تفاعل جسيم مشحون وحقل كهرطيسي خارجي. في معالجة كاملة للمسألة ، يجب ان نعتبر الحقل الكهرطيسي جملة ديناميكيـــة وتعامل احداثياتها ودفوعها وفقما تقتضيه صياغة ميكانيك الكم . يملك الحقل لدى معاملته بهذه الطريقة الكثير من خواص الجسيمات ، ولقد ذكرنا من قبل ان كوانتا الحقل الكهرطيسي تسمى فوتونات . ان عملية التفاعل بين جسيم وحقل كهرطيسي ليست سوى عملية توليد وتدمير للفوتونات تحت تأثير التفاعل بين الحقل والجسيم المشحون . ستكون الدراسة المتقدمة لهذا الموضوع من نصيب ميكانيك الكم II، في السنة القادمة . وفي دراستنا الحالية ، سوف نعتبر اثر الحقل في الجسيم المشحون تفاعلاً بين الجسيم ومتحولات الحقل دون ان يكون للجسيم اى اثر في الحقل الخارجي المطبق .

§١. حركة جسيم دون سبين في حقل كهرطيسي :

كنا قد رأينا في الفصل الأول ان الهاميلتوني الكلاسيكي الذى يصف حركة جسيم في حقل كهرطيسي يُعطى بالعلاقة

$$H = \frac{1}{2m} (\underline{P} - Q \underline{A})^2 + Q \phi \qquad (1.1)$$

حيث إن Q شحنة الجسيم و $\underline{A}$ و ϕ الكمونان الشعاعي والسلمي على الترتيب و $\underline{P}$ هو شعاع الدفع القانوني الذى يرتبط بالدفع الخطي بالعلاقة

$$\underline{P} = m \underline{v} + Q \underline{A} \qquad (1.2)$$

نبدأ دراستنا الكوانتية باهمال السبين بادئ الامر لنحصل من ثم على معادلة شرودنجر التي تصف حركة الجسيم . واما عملية ادخال السبين للحصول على معادلة باولي فهي امر سهل . نحصل على موئثر هاميلتون بدءاً من (1.1) بعد مناظرة الحد الاول

$$(\underline{P} - Q\underline{A})^2 = \hat{P}^2 + Q^2 A^2 - Q(\underline{A}\cdot\underline{P} + \underline{P}\cdot\underline{A}) \qquad (1.3)$$

يتعلق $\underline{A}$ و ϕ بالاحداثيات وربما ايضا بالزمن . ونلاحظ ان مركبات $\hat{\underline{A}}$ و $\hat{\underline{P}}$ هرمیتية ، الا أن الجداء

$$\hat{\underline{A}}\cdot\hat{\underline{P}} = \hat{A}_x \hat{P}_x + \hat{A}_y P_y + \hat{A}_z \hat{P}_z ,$$

ليس هرميتيا بالضرورة، وذلك لأن $(\hat{\underline{A}}\cdot\hat{\underline{P}})^{\dagger} = \hat{\underline{P}}^{\dagger}\hat{\underline{A}}^{\dagger} = \hat{\underline{P}}\cdot\hat{\underline{A}}$. ولكن مناظرة هذا الجداء تقود الى موئثر هرميتي

$$(\hat{\underline{A}}\cdot\hat{\underline{P}} + \hat{\underline{P}}\cdot\hat{\underline{A}})^{\dagger} = \hat{\underline{P}}\cdot\hat{\underline{A}} + \hat{\underline{A}}\cdot\hat{\underline{P}}$$

يعطى موئثر هاميلتون اذن بالعبارة

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}[\hat{\underline{P}}^2 - Q(\hat{\underline{A}}\cdot\hat{\underline{P}} + \hat{\underline{P}}\cdot\hat{\underline{A}}) + Q^2\hat{A}^2] + Q\phi \qquad (1.4)$$

وفي التمثيل الاحداثي يكون

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{i\hbar}{2m}Q(\nabla\cdot\underline{A} + \underline{A}\cdot\nabla) + \frac{Q^2}{2m}A^2 + Q\phi \qquad (1.5)$$

تتعين القيم الممكنة لطاقة الجسيم بالقيم الخاصة لمعادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن

$$\hat{H}_0 \psi = E\psi$$

ويوصف التطور الزمني للجملة بمعادلة شرودنجر التابعة للزمن

$$\hat{\mathcal{H}}_0 \psi = i\hbar\, \partial\psi/\partial t$$

وقد يكون من المفيد ان يألف القارئ على معنى بعض الرموز الظاهرة في $\hat{\mathcal{H}}_0$ ، وذلك بملاحظة ان عباراتها الصريحة هي

$$\underline{A}\cdot\nabla\psi = (A_x i + A_y j + A_z k)\left(\frac{\partial\psi}{\partial x} i + \frac{\partial\psi}{\partial y} j + \frac{\partial\psi}{\partial z} k\right)$$

$$= A_x \frac{\partial\psi}{\partial x} + A_y \frac{\partial\psi}{\partial y} + A_z \frac{\partial\psi}{\partial z}$$

$$\nabla\cdot\underline{A}\psi = \left(\frac{\partial}{\partial x} i + \frac{\partial}{\partial y} j + \frac{\partial}{\partial z} k\right)(A_x\psi i + A_y\psi j + A_z\psi k)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}(A_x\psi) + \frac{\partial}{\partial y}(A_y\psi) + \frac{\partial}{\partial z}(A_z\psi)$$

$$= \left(\frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}\right)\psi + A_x\frac{\partial\psi}{\partial x} + A_y\frac{\partial\psi}{\partial y} + A_z\frac{\partial\psi}{\partial z}$$

$$= (\nabla\cdot\underline{A})\psi + \underline{A}\cdot\nabla\psi = (div\,\underline{A})\psi + \underline{A}\cdot\nabla\psi$$

$$A^2 = A_x^2 + A_y^2 + A_z^2$$

تمرين : برهن على أن

$$[\hat{\underline{P}}, F(x,y,z)] = -i\hbar\nabla F$$

$$[\hat{\underline{P}}, \hat{\underline{A}}] = -i\hbar\, div\, \underline{A} \qquad (١٠٦)$$

$$\hat{\underline{P}}\cdot\hat{\underline{A}} + \hat{\underline{A}}\cdot\hat{\underline{P}} = 2\,\hat{\underline{A}}\cdot\hat{\underline{P}} - i\hbar\, div\,\underline{A} \qquad (١٠٧)$$

§2 . معادلة پاولي ـ شرودنجر :

اذا ادخلنا السبين في اعتبارنا ، نرى ان الجسيم يكتسب في هذه الحالة طاقــة

ا لامنا ناجد من سبينه

$$V_s = -\hat{\underline{M}}\cdot\hat{\underline{B}} = -\frac{Q}{m}\,\hat{\underline{B}}\cdot\hat{\underline{S}} \qquad (2.1)$$

حيث إن $\underline{M}$ هو العزم المغناطيسي السبيني وهو يوازى $\underline{S}$ او يعاكسه حسبما تكون Q موجبة او سالبة . وهكذا يصبح مؤثر هاميلتون الجديد

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 - \frac{Q}{m}\,\hat{\underline{B}}\cdot\hat{\underline{S}} \qquad (2.2)$$

حيث إن $\hat{\mathcal{H}}_0$ هو الهاميلتوني قبل اعتبار السبين ويعطى بالعلاقة (1.5).يتعين التطور الزمني لحالة الجملة بما يعرف بمعادلة پاولي شرودنجر

$$\mathcal{H}\Psi = i\hbar\,\partial\Psi/\partial t \qquad (2.3)$$

ومن الواضح هنا ان التابع الموجي هو عمود مركبتين $\Psi(\underline{r},t)$ وان $\hat{\mathcal{H}}$ مصفوفة (2×2) :

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 I_2 + \hat{B}_x\hat{S}_x + \hat{B}_y\hat{S}_y + \hat{B}_z\hat{S}_z \qquad (2.4)$$

أى ان الشكل الفعلي لمعادلة پاولي شرودنجر هو

$$\begin{pmatrix} \mathcal{H}_0 + \frac{\hbar}{2}\hat{B}_z & \frac{\hbar}{2}(\hat{B}_x - i\hat{B}_y) \\ \frac{\hbar}{2}(\hat{B}_x + i\hat{B}_y) & \hat{\mathcal{H}}_0 - \frac{\hbar}{2}\hat{B}_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_+(\underline{r},t) \\ \Psi_-(\underline{r},t) \end{pmatrix} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \Psi_+(\underline{r},t) \\ \Psi_-(\underline{r},t) \end{pmatrix} \qquad (2.5)$$

في حالة خاصة عندما يكون الحقل الكهرطيسي مستقرا (يكون الكمونان السلمي والشعاعي مستقلين عن الزمن) ، يكون لدينا بحسب (I.2.18)

$$(\nabla\cdot\underline{A}) = 0 \qquad (2.6)$$

وبحسب (١٠٧) نجد

$$\hat{P}.\hat{A} + \hat{A}\cdot\hat{P} = 2\,\hat{A}\cdot\hat{P} \tag{2.7}$$

ويؤول مؤثر هاميلتون (١٠٩) في هذه الحالة الى

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m}\left[\hat{P}^2 - 2Q\,\hat{A}\cdot\hat{P} + Q^2\hat{A}^2\right] + Q\hat{\Phi} - \frac{Q}{m}\,B\cdot\hat{S}$$

§3. حركة الكترون حر في حقل كهرطيسي :

ندرس في هذا البحث حركة الكترون في حقل مغناطيسي ساكن منتظم ، وأما الحقل الكهراكدي فغير موجود . يؤول شرط لورانتز كما هي الحال في حالة الحقل الكهرطيسي المستقر الى $(\nabla\cdot A) = 0$. وبحسب (١٠٦) نرى ان موثري الدفع والكمون الشعاعي متآلفان

$$\hat{P}.\hat{A} = \hat{A}\cdot\hat{P} \tag{3.1}$$

باسقاط السبين موقتا من الاعتبار نكتب مؤثر هاميلتون بالشكل

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{1}{2m}\left[\hat{P}^2 + 2e\,\hat{A}\cdot\hat{P} + e^2\hat{A}^2\right] \tag{3.2}$$

مادام ليس ثمة حقل كهراكدي . يرتبط الكمون الشعاعي A والحقل المغناطيسي B بالعلاقة

$$B = \nabla \times A \tag{3.3}$$

بما أن الكمون الشعاعي يمثل حقلا منتظما اذن يمكن كتابته بالشكل

$$A = \frac{1}{2}\,B \times r \tag{3.4}$$

ويمكن التحقق من صحة هذه العلاقة كما يلي : لنختر جملة محاور احداثية متعامدة اشعة واحداثها (i, j, k)، ولنختر المحور z موازيا لاتجاه الحقل B ،

فتكون مركبات $\underline{B}$ هي $(0, 0, B)$. ويكون

$$\nabla \times \underline{A} = \nabla \times (\tfrac{1}{2} \underline{B} \times \underline{r}) \tag{3.5}$$

$$= \nabla \times \frac{B}{2}(xi - yj)$$

$$= Bk = (0, 0, B)$$

ويكون ايضا

$$\underline{A} \cdot \underline{P} = \tfrac{1}{2}(\underline{B} \times \underline{r}) \cdot \underline{P} = \tfrac{1}{2} \underline{B} \cdot (\underline{r} \times \underline{P}) = \tfrac{1}{2} \underline{B} \cdot \underline{L} \tag{3.6}$$

$$A^2 = \tfrac{1}{4} |\underline{B} \times \underline{r}|^2 = \tfrac{1}{4} B^2 r^2 \sin^2\theta = \tfrac{1}{4} [B^2 r^2 - (\underline{B} \cdot \underline{r})^2] \tag{3.7}$$

وبما ان جملة المحاور قد اختيرت اختيارا يتجه فيه الحقل المغناطيسي $\underline{B}$ باتجاه المحور z ، اذن

$$\hat{\underline{A}} \cdot \hat{\underline{P}} = \tfrac{1}{2} B \hat{L}_z \quad ; \quad \hat{A}^2 = \tfrac{1}{4}[B^2(x^2 + y^2 + z^2) - B^2 z^2] \tag{3.8}$$

$$= \tfrac{1}{4} B^2 (x^2 + y^2)$$

وبتعويض النتائج الاخيرة في (3.2) نجد

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \frac{eB}{2m} \hat{L}_z + \frac{e^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2) \tag{3.9}$$

وبوضع

$$\omega = eB/2m \tag{3.10}$$

نكتب $\hat{H}_0$ بالشكل

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \omega \hat{L}_z + \tfrac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2) \tag{3.11}$$

نلاحظ في هذه المعادلة ان $\hat{L}_z = -i\hbar\, \partial/\partial\phi$ يتآلف والهاميلتوني لانه يتآلف والحد الاخير كما يتآلف مع $\hat{\underline{P}}^2$ بعد ملاحظة أن

$$\hat{P}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 + \frac{\hat{L}^2}{r^2} \qquad (3.12)$$

ومن السهل ان نرى ان $\hat{H}_0$ و L_z يتآلفان و $\hat{P}_z$. وبناء على هذا تشكل الملحوظات $\{\hat{H}_0 , \hat{L}_z , \hat{P}_z\}$ مجموعة ملحوظات متآلفة عظمى ، ومن الممكن اختيار توابع موجية هي في آن واحد توابع خاصة للموءثرات الثلاثة . يمكن فصل الطاقة الممثّلة بموءثرها ميلتون الى ثلاثة اقسام : الطاقة المتعلقة بالحركة في اتجاه z ، والحد الحاوى $\hat{L}_z$ والباقي من الطاقة والتعلق بالحركة في الاتجاهين x و y . نرمز الى الجزء الاخير بالرمز $\hat{H}_0$ ، فيكون

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2) \qquad (3.13)$$

لاحظ ان $\hat{H}_0$ هو الهاميلتوني الممثل لهزاز توافقي بسيط ثنائي البعد ، وأن الطاقة المتعلقة به هي مجموع طاقتي هزازين توافقيين بسيطين خطيين . يمكن أن نكتب التوابع الخاصة المشتركة لـ $\hat{H}_0$ و $\hat{L}_z$ و $\hat{P}_z$ على الشكل

$$\Psi = \Psi_{n m_\ell p_z} \qquad (3.14)$$

حيث تعود الادلة n و m_ℓ و p_z الى الاعداد الكوانتية الظاهرة في المعادلات الخاصة التالية

$$\hat{H}_0 \Psi_{n m_\ell p_z} = (n+1) \hbar \omega \Psi_{n m_\ell p_z} \qquad (3.15)$$

$$\hat{L}_z \Psi_{n m_\ell p_z} = m_\ell \hbar \Psi_{n m_\ell p_z} \qquad (3.16)$$

$$\hat{P}_z \Psi_{n m_\ell p_z} = p_z \Psi_{n m_\ell p_z} \qquad (3.17)$$

ان الحالة الدنيا للهزاز التوافقي الثنائي البعد تابع زوجي في x و y معا

$$\psi_{0 m_\ell p_z}(x, y, z) = \psi_{0 m_\ell p_z}(-x, -y, z) \qquad (3.18)$$

والحالة المهيجة الأولى تابع فردي بالنسبة الى تغيير اشارتي x و y معا ، ومن السهولة ان نلاحظ ان الحالات المتعلقة بعدد كوانتي n زوجي هي توابع زوجية في x و y معا وان الحالات المتعلقة بعدد كوانتي n فردي هي توابع فردية في x و y معا . تلاحظ ايضا في المعادلة (3.16) ان القيم الزوجية لـ m_ℓ ترتبط بتوابع موجية زوجية في x و y معا ، وان القيم الفردية لـ m_ℓ ترتبط بتوابع موجية فردية في x و y معا . بناء على هذا يجب ان يكون العددان الكوانتيان n و m_ℓ اللذان يعينان الحالة $\psi_{n m_\ell p_z}$ فرديان معا او زوجيان معا والا لانعدم التابع الموجي . نكتب المعادلة الخاصة للطاقة والمتعلقة بموثر هاميلتون الكلي $\hat{H}_0$ على الشكل

$$\hat{H}_0 \psi_{n m_\ell p_z} = \left[\frac{1}{2m} p_z^2 + (n+1)\hbar\omega + m_\ell \hbar\omega\right] \psi_{n m_\ell p_z} \qquad (3.19)$$

$$= \left[\frac{1}{2m} p_z^2 + (n + m_\ell + 1)\hbar\omega\right] \psi_{n m_\ell p_z}$$

حيث ان n و m_ℓ فرديان او زوجيان معا . بما ان الطاقة الكلية للالكترون في حقل كهرطيسي موجبة حتما ، وذلك لأن $\hat{H}_0$ مربع موثر هرميتي

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} (\underline{P} + e\underline{A})^2$$

فنجد ان

$$n + m_\ell = 2r \geq 0 \qquad (3.20)$$

ومنه نرى أن

$$n \geq -m_\ell \qquad (3.21)$$

يمكن ان تكتب الطاقة الكلية بالشكل

$$E_{n m_\ell p_z} = (2r+1)\hbar\omega + p_z^2/2m \qquad r=0,1,2,\dots \tag{3.22}$$

تمثل الكمية p_z دفع الالكترون بالاتجاه z ، وهي غير مكممة ويمكن ان تأخذ اية قيمة . اما الطاقة الكلية للالكترون فتتركب من الطاقة الحركية المتعلقة بالحركة بالاتجاه z (غير مكممة) ، ومن الطاقة المتعلقة بالحركة في المستوى xy وتعطى ب $(2r+1)\hbar\omega$. والطاقة الاخيرة متحللة من مرتبة غير منتهية . بالفعل وكما تظهر العلاقتان (3.20)و(3.21) يوجد عدد غير منته من القيم للثنائية (n, m_ℓ) حيث يكون المجموع $2r$ ثابتا . يمكن العدد الكوانتي n أن يأخذ القيم الصحيحة غير السالبة $n \geqslant 0$ كافة ، بينما يمكن m_ℓ أن يأخذ أية قيمة صحيحة محققة للعلاقة $-\infty \leqslant -m_\ell \leqslant n$. وبالطبع فالطاقة الكلية متحللة من مرتبة غير منتهية ، فمن اجل اية قيمة معطاة للمجموع $2r$ توجد قيمة ل p_z تجعل الطاقة الكلية تساوي E ، والمجموع $2r$ في حد ذاته يمكن تشكيله ايضا بعدد غير منته من الطرق. نلاحظ ان اصغر قيمة للطاقة هي $\hbar\omega$ ، وهي توافق حركة معدومة على المحور z و $r=0$. وهي الطاقة الدنيا للهزاز التوافقي الثنائي البعد .

لكي نأخذ السبين بعين الاعتبار نضيف الى الهاملتوني $\mathcal{H}_0$ الحد الناتج من السبين

$$\frac{e}{m}\,\underline{B}\cdot\hat{\underline{S}} = \frac{eB}{m}\,\hat{S}_z \tag{3.23}$$

ويكون موئثرها ميلتون

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \frac{eB}{m}\hat{S}_z = \hat{\mathcal{H}}_0 + 2\omega\hat{S}_z \tag{3.24}$$

وتصبح اذن طاقة الالكترون على الشكل التالي

$$\begin{aligned} E_{n m_\ell p_z m_s} &= (2r+1+2m_s)\hbar\omega + p_z^2/2m \\ &= (2r+1\pm 1)\hbar\omega + p_z^2/2m \end{aligned} \tag{3.25}$$

تعود اشارة ± الى الاتجاهين الممكنين لسبين الالكترون بالنسبة للحقل المغناطيسي.
ومن الواضح ان السويتين $(r, m_s = 1/2)$ و $(r+1, m_s = -1/2)$ متطابقتان .

طريقة ثانية :

ان الهاملتوني الذى يعبر عن حركة الالكترون في حقل مغناطيسي منتظم غير وحيد، وبالفعل يوجد عدد غير منته من الكمونات الشعاعية $\underline{A}$ التي يمكن ان تستعمل لتمثل حقلا مغناطيسيا منتظما باتجاه المحور z . تعبر المعادلتان (2.6) و (3.3) عن الشرطين الواجب على $\underline{A}$ تحقيقهما لكي تكون المعادلة (3.2) مقبولة .

لنعتبر مثلا الكمون الشعاعي

$$A_x = -By \quad , \quad A_y = 0 \quad , \quad A_z = 0 \tag{3.26}$$

وبهذا الاختيار للكمون الشعاعي تصبح المعادلة الخاصة (3.2)

$$\left[\frac{1}{2m}(\hat{P}_x - eBy)^2 + \frac{1}{2m}(\hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2)\right]\psi = E\psi \tag{3.27}$$

ونرى كما هي الحال في الطريقة الاولى ان الاحداثي z دوري (مفقود من المعادلة) لذلك يكون $\hat{P}_z$ ثابتا للحركة . ولكن x هنا دورى ايضا ولذلك فان $\hat{P}_x$ ثابت للحركة ايضا . وتكون الملحوظات $\hat{H}$ و $\hat{P}_x$ و $\hat{P}_z$ متآلفة، اى ان المجموعة $\{\hat{H}, \hat{P}_x, \hat{P}_z\}$ تامة ، وتملك من ثَمّ مجموعة كاملة مشتركة من التوابع الخاصة.
يجب ان تكون هذه التوابع من الشكل

$$\psi = e^{ip_x x/\hbar} \, e^{ip_z z/\hbar} \, Y(y) \tag{3.28}$$

بتعويض ψ في (3.27) نجد ان $Y(y)$ ، يحقق المعادلة

$$\frac{1}{2m}(\hat{P}_y^2 - 2ep_x By + e^2B^2y^2)\, Y(y) = E' \, Y(y) \tag{3.29}$$

حيث ان

$$E' = E - \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_z^2) \qquad (3.30)$$

بوضع

$$y_0 = p_x / eB \qquad (3.31)$$

تصبح المعادلة (3.29)

$$\frac{1}{2m}\left[P_y^2 + \frac{e^2B^2}{2m}(y-y_0)\right] = (E' + p_x^2/2m)\,Y(y) \qquad (3.32)$$

$$= (E - p_z^2/2m)\,Y(y)$$

وهي المعادلة الخاصة لهزاز توافقي احادى البعد تواتره الزاوى

$$\omega_1 = eB/m = 2\omega \qquad (3.33)$$

حيث ان ω التواتر الزاوي الذى ادخلناه في الطريقة السابقة . وبناء على هذا تكون طاقة هذا الهزاز

$$E' + \frac{p_x^2}{2m} = E - \frac{p_z^2}{2m} = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_1 \qquad (3.34)$$

ومن هذه العلاقة نجد طاقة الالكترون في الحقل

$$E = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_1 + p_z^2/2m \qquad (3.35)$$

وبدلالة التواتر الزاوى ω نجد ان

$$E = (2n+1)\hbar\omega + p_z^2/2m \qquad (3.36)$$

وهو مايطابق نتيجة الطريقة الاولى . تظهر هذه المعادلة ان الطاقة الخاصة مستقلة عن الدفع p_x . وهذا الاخير ثابت للحركة هنا ويمكن ان يأخذ أية قيمة بين

$-\infty$ الى $+\infty$ ، ولذلك فان كل طاقة خاصة متحللة من مرتبة غير منتهية .

اما التوابع الخاصة (3.28) فتصبح

$$(3.37) \qquad \psi_{n p_x p_z} = e^{i(x p_x + z p_z)/\hbar} \; e^{-eB(y-y_0)^2/2\hbar} H_n\left[\sqrt{\frac{eB}{\hbar}}(y-y_0)\right]$$

وبادخال السبين تكون التوابع الخاصة

$$(3.38) \qquad \psi_{n p_x p_z m_s} = \psi_{n p_x p_y} \xi_{m_s}$$

والطاقات الموافقة

$$(3.39) \qquad E = (n + \tfrac{1}{2} + m_s) \frac{eB\hbar}{m} + \frac{p_z^2}{2m}$$

§ ٩ ـ التفاعل السبيني ـ المداري

§ (٩.١) طاقة التفاعل السبيني المداري

نقدم في هذا البند تفسيرا لنشوء الثنائيات في اطياف الذرات شبه الهيدروجينية وذرات المعادن القلوية المشار اليها في (١١٠ §١) . لنعتبر سويات الطاقة المتعلقة باثارة ابعد الالكترونات عن النواة (أى الالكترون التكافوءى) . توءثر الالكترونات الداخلية او الكترونات اللب تأثيرا ضئيلا في حركة الالكترون التكافوءى، ويعبر عن اثرها بكمون مركزى (يتعلق فقط بـ ٢) . ويرمز الى حاصل جمعه مع الكمون الكولوني الذى تولده النواة بالرمز $\phi(r)$ ،وتكون الطاقة الكامنة للالكترون التكافوءى $V(r) = -e\,\phi(r)$.

في جملة احداثيات مرتبطة بالنواة يلاحظ المراقب حقلا كهربائيا فقط تولده النواة وغمامة الكترونات اللب المحيطة بها . يرمز الى هذا الحقل بالرمز ع وهو كما ذكرنا مشتق من الكمون $\phi(r)$. في جملة احداثيات تتحرك مع الالكترون يلاحظ المراقب وجود حقل مغناطيسي ، وهو ينشأ عن التحويلات النسبية

بين الحقلين الكهربائي والمغناطيسي (انظر المرجع 13 ، صفحة 355) . تعطى شدة هذا الحقل بالعلاقة

$$\underline{B} = -\frac{\underline{v}}{c^2} \times \underline{\mathcal{E}} \qquad (4.1)$$

حيث ان $\underline{v}$ سرعة الالكترون التكافوئى في الذرة .

يتفاعل الحقل المغناطيسي $\underline{B}$ والعزم المغناطيسي $\underline{M}$ للالكترون منتجـا عزما يحاول فتل السبين . ومؤديا من ثم الى ترنح سبين الالكترون . تساوى الطاقة الكامنة الناتجة من تفاعل السبين والحقل المغناطيسي الذى يتعرض له الالكترون المتحرك المقدار $(-\underline{M}.\underline{B})$. ولكن يجب هنا ادخال اثر نسبي آخر اضافة الى أثر التحويلات بين الحقلين الكهربائي والمغناطيسي ، وهذا الامر حركي صرف ينتج من تسارع الالكترون ويؤدى آخر الامر الى ضرب طاقة التفاعل السابقة بعامل قدره $\frac{1}{2}$. يدعى هذا العامل عامل توماس ، وعلى اساسه تأخذ طاقة التفاعل السبيني المدارى V_{SL} الصيغة

$$V_{SL} = -\frac{1}{2}\,\underline{M}\cdot\underline{B} = \frac{1}{2c^2}\,\underline{M}\cdot(\underline{v}\times\underline{\mathcal{E}}) \qquad (4.2)$$

$$= \frac{1}{2mc^2}\,\underline{M}\cdot(m\underline{v}\times\underline{\mathcal{E}})$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\,(\underline{\mathcal{E}}\times\underline{P})\cdot\underline{M}$$

بما ان $\underline{\mathcal{E}}$ يشتق من كمون ϕ يتعلق بـ r فقط ، يكون

$$\underline{\mathcal{E}} = -\nabla\phi = -\frac{d\phi}{dr}\frac{\underline{r}}{r} = \frac{1}{er}\frac{dV}{dr}\,\underline{r}\,. \qquad (4.3)$$

واعتمادا على العلاقة الاخيرة وعلى (1 . 7 . XI) نجد

$$V_{SL} = -\frac{1}{2mc^2}\frac{1}{er}\frac{dV}{dr}(\underline{r}\times\underline{P})\cdot(-\frac{e}{m}\underline{S}) \tag{4.4}$$

$$= \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\,\underline{L}\cdot\underline{S}$$

يكتب هاميلتوني الالكترون التكافوءى بعد مراعاة طاقة التفاعل السبيني ـ المداري بالشكل

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} + \hat{V}_{SL} \tag{4.5}$$

حيث ان

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + V(r) \qquad (V(r) = -e\,\Phi(r)) \tag{4.6}$$

$$\hat{V}_{SL} = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\,\hat{\underline{L}}\cdot\hat{\underline{S}} \tag{4.7}$$

§ (4 . 2) نشوء الثنائيات

من اجل قيمة معينة لـ ℓ تتعلق قيمة V باتجاهي $\underline{L}$ و $\underline{S}$ بالنسبة الى بعضهما . لكن $\underline{S}$ يمكن ان يأخذ فقط اتجاهين بالنسبة الى $\underline{L}$ ، ولذلك فان التفاعل السبيني ـ المدارى يشطر كل سوية طاقة الى سويتين قريبتين من بعضهما بعضا وتقابل احداهما الحالة التي يكون فيها $\underline{L}$ و $\underline{S}$ متوازيين او سبين للأعلى $(j = \ell + 1/2)$ وتقابل الاخرى الحالة التي يكون فيها $\underline{L}$ و $\underline{S}$ متعاكسين او سبين للأسفل $(j = \ell - 1/2)$ ،على حين تبقى الحالة (s) أى $\ell = 0$ مفردة وبما ان

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\,\hat{\underline{L}}\cdot\hat{\underline{S}} \tag{4.8}$$

لذلك نكتب V_{SL} بالشكل

$$\hat{V}_{SL} = \frac{1}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\left(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2\right) \tag{4.9}$$

تتآلف المؤثرات $\hat{J}^2$ و $\hat{L}^2$ و $\hat{S}^2$ مع بعضهما كما تتآلف جميعا مع $\hat{H}$. واستنادا الى هذا يمكن اختيار توابع موجية مشتركة $\psi_{n\ell m_j}$ كسبينورات خاصة للمجموعة التامة السابقة . يرمز n هنا الى العدد الكمي الرئيسي وهو يرتبط بالجزء القطري من التابع الموجي . عندما يؤثر المؤثر $(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$ على السبينور الخاص $\psi_{n\ell m_j}$ تؤول النتيجة الى عدد مضروب بالتابع الموجي ، ولهذا يكون

$$\hat{V}_{SL}\psi_{n\ell m_j} = \frac{1}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}\right]\hbar^2\psi_{n\ell m_j} \tag{4.10}$$

ان قيمة الحد $\hat{V}_{SL}$ صغيرة بالمقارنة مع $\hat{H}$ ، ولذلك نعتبر الحد V_{SL} المضطرب في الهاميلتوني $\mathcal{H}$. اذا رمزنا ب E_n لطاقة السوية غير المضطربة n، آل التصحيح الواجب اضافته اليها ، الى القيمة المتوقعة للحد المضطرب $\hat{V}_{SL}$ في الحالة $\psi_{n\ell m_j}$. اى أن

$$\Delta E_{n\ell m_j} = \langle V_{SL}\rangle_\psi \tag{4.11}$$

$$= \frac{1}{4m^2c^2}\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}\right]\hbar^2\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right\rangle_\psi$$

ولكن

$$\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right\rangle_\psi = \int \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\,\psi^\dagger_{n\ell m_j}\,\psi_{n\ell m_j}\,d\tau \tag{4.12}$$

وكذلك نرى أن

$$\psi^\dagger_{n\ell m_j}\,\psi_{n\ell m_j} = \psi^*_{n\ell m_j}\,\psi_{n\ell m_j} \tag{4.13}$$

ولهذا يكون

$$(4.14)\qquad \left\langle \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right\rangle_{\psi} = \int \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}|Y_{\ell m}|^2 R_{n\ell}^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

$$= \int_0^{\infty} \frac{1}{r}\frac{dV}{dr} R_{n\ell}^2\, dr$$

$$= \left\langle \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right\rangle_{n\ell}$$

بناء على هذا يكون التصحيح الواجب اضافته الى السوية E_n هو

$$(4.15)\qquad \langle V_{SL}\rangle = \frac{1}{4m^2c^2}\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}\right]\hbar^2 \times \left\langle \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right\rangle_{n\ell} \qquad (j = \ell \pm 1/2)$$

$$= \begin{cases} \dfrac{1}{4m^2c^2}\left\langle \dfrac{1}{r}\dfrac{dV}{dr}\right\rangle_{n\ell} \ell\hbar^2 & (j=\ell+\frac{1}{2}) \\[2ex] \dfrac{-1}{4m^2c^2}\left\langle \dfrac{1}{r}\dfrac{dV}{dr}\right\rangle_{n\ell} (\ell+1)\hbar^2 = -A(\ell+1)\hbar^2 & (j=\ell-\frac{1}{2}) \end{cases}$$

وهكذا نرى ان ادخال التفاعل السبيني المداري يقود الى انقسام السوية E_n الى سويتين

$$(4.16)\qquad E_{n\ell j} = E_n + \langle V_{SL}\rangle \qquad (j = \ell \pm \tfrac{1}{2})$$

$$(4.17)\qquad \Leftrightarrow \begin{cases} E_{n\ell j_+} = E_n + A\ell\hbar^2 & (j = \ell + \frac{1}{2}) \\ E_{n\ell j_-} = E_n - A(\ell+1)\hbar^2 & (j = \ell - \frac{1}{2}) \end{cases}$$

يفصل بين هاتين السويتين مقدار من الطاقة

$$\Delta E_{\text{ثنائية}} = (2\ell+1)\hbar^2 A$$

بناء على هذا تختلف طاقة الحالة $p_{3/2}$ $(\ell=1,\ j=3/2)$ عن طاقة الحالة $p_{1/2}$ $(\ell=1\ ,\ j=1/2)$ وذلك طبعا من اجل القيمة n نفسها ، بالمقدار

$$\Delta E_{p_{3/2}-p_{1/2}} = 3\hbar^2 A = \frac{3\hbar^2}{4m^2c^2}\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right\rangle_{n\ell} \tag{4.19}$$

نكرر القول ان الحالات (s) أو $\ell=0$ لا تعاني انشطارا . ويمكن معاينة هذا ايضا من العلاقة (4.11) بعد وضع $\ell=0$ و $j=1/2$ لنجد أن $\Delta E=0$.

ينتج الخطان D في اشعاع الصوديوم من جراء الانتقال من ادنى سويتين $p_{3/2}$ و $p_{1/2}$ الى ادنى سوية $s=1/2$ ، اى من الحالة $(n=3,\ \ell=1,\ j=1\pm 1/2)$ الى الحالة $(n=3,\ \ell=0,\ j=1/2)$.

§ (4.3) الثنائيات في الذرات شبه الهيدروجينية

في هذه الحالة تكون الطاقة الكامنة للالكترون $V=-Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$ ويكون من ثم :

$$V_{SL} = \frac{1}{4m^2c^2}\,\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^3}\,(J^2-L^2-S^2) \tag{4.20}$$

$$= \frac{1}{4m^2c^2}\,\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^3}\left\{j(j+1)-\ell(\ell+1)-\frac{3}{4}\right\}\hbar^2$$

واضح أن V_{SL} تتآلف مع $\hat{J}^2$ و $\hat{L}^2$ و $\hat{S}^2$ (ولكنها لا تتآلف مع $\hat{H}$) . باستخدام $\psi_{n\ell mj}$ جملة كاملة لتمثيل V_{SL} نرى انه من اجل n معطى يكون الجزء الموافق لهذه القيمة لـ n من المصفوفة الممثلة يكون قطريا . ويكون

$$(4.21)\qquad (V_{SL})_{n\ell mj,n\ell'm'j'} = \frac{Z e^2 \hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2 c^2}\left\{j(j+1)-\ell(\ell+1)-\frac{3}{4}\right\}\times \left(\frac{1}{r^3}\right)_{n\ell mj,n\ell'm'j'}$$

وسوف نقوم الان بحساب المصفوفة الممثلة الى $(1/r^3)$

$$(4.22)\qquad \left(\frac{1}{r}\right)^3_{n\ell mj,n\ell'm'j'} = \int \frac{1}{r^3}\,\psi^{\dagger}_{n\ell mj}\,\psi_{n\ell'm'j'}\,d\tau$$

وبسبب تعامد $\psi_{n\ell mj}$ نرى ان هذا التكامل ينعدم مالم تكن $\ell=\ell'$ و $m=m'$
و $j=j'$ ، وهذا يتفق مع ما ذكرناه سابقا . ويكون لدينا

$$(4.23)\qquad \left(\frac{1}{r^3}\right)_{n\ell mj,n\ell mj} = \int \frac{1}{r^3}\,\psi^{\dagger}_{n\ell mj}\,\psi_{n\ell mj}\,d\tau$$

$$= \int \frac{1}{r^3}\,\psi^{*}_{n\ell m}\,\psi_{n\ell m}\,d\tau$$

$$= \int \frac{1}{r^3}\,R^2_{n\ell}\,|Y_{\ell m}|^2\,r^2 \sin\theta\,dr\,d\phi\,d\theta$$

$$= \int_0^\infty \frac{1}{r}\,R^2_{n\ell}\,dr$$

وبالتعويض من اجل $R_{n\ell}$ من المعادلة (IX.A.39) نجد ان

$$(4.24)\qquad \left(\frac{1}{r^3}\right)_{n\ell,n\ell} = \left(\frac{e^2 m Z}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\right)^3 \frac{4}{n^3}\,\frac{(n-\ell-1)!}{\{(n+\ell)!\}^3}\int_0^\infty e^{-x}x^{2\ell-1}\left(L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}\right)^2 dx$$

ويحسب هذا التكامل باستعمال النتيجة (IX.A.39) التي نجد منها

$$(4.25)\qquad \left(\frac{1}{r^3}\right)_{n\ell,n\ell} = \left(\frac{e^2 m Z}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{n^3\,\ell(\ell+1)(\ell+1/2)}$$

وبالاستفادة من (4.24) و(4.20) و(4.17) نجد أن

$$E_{nlj_+} = E_n\left[1 - \frac{(\alpha Z)^2}{n(l+1)(2l+1)}\right] \tag{4.26}$$

$$E_{nlj_-} = E_n\left[1 + \frac{(\alpha Z)^2}{nl(2l+1)}\right] \tag{4.27}$$

حيث ان α هو ثابت البنية الدقيقة $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$. نلاحظ ان التحلل بالنسبة للعدد الكوانتي m لا يزال قائما .

يلاحظ تجريبيا ان العلاقتين (4.26)و (4.27) غير مرضيتين تماما، ويعود ذلك الى ان التصحيح الناشيء عن التفاعل السبيني ـ المدارى هو من مرتبة التغيير الذى تقتضيه النسبية الخاصة في كتلة الالكترون بسبب سرعته .

§ (4.4) الهاميلتوني النسبي

يعطى هاميلتوني الالكترون بحسب النسبية الخاصة بالعلاقة

$$\mathcal{H}_r = mc^2\left(1 - \frac{P^2}{m^2c^2}\right)^{1/2} - mc^2 + V \tag{4.28}$$

حيث ان m الكتلة السكونية ، فاذا فرضنا ان سرعة الالكترون v صغيرة بالمقارنة مع سرعة الضوء ، امكن كتابة $\mathcal{H}_r$ بالصورة التقريبية التالية

$$\mathcal{H}_r = \frac{P^2}{2m} + V - \frac{P^4}{8m^3c^3} = H - \frac{P^2}{8m^3c^2} \tag{4.29}$$

بناء على هذا يجب ان يصحح الهاميلتوني الذى يأخذ التفاعل السبيني المدارى بالاعتبار،بطرح الحد $P^2/8m^3c^2$ منه . اى يجب استبدال $\hat{\mathcal{H}}_r$ فيه ب $\hat{H}$.
سوف نعامل هذا الحد على انه اضطراب اضافي يسبب انزياحا اضافيا في سويات الطاقة المعينة ب (n,l,m,j) . ولهذا نأخذ الحد المضطرب λK بالشكل

$$\lambda = -\frac{1}{2m\ c^2} \quad , \hat{K} = \left(\frac{\hat{P}^2}{2m}\right)^2 = (\hat{H} - \hat{V})^2 \tag{4.30}$$

ويكون لدينا :

$$K\psi_{n\ell mj} = (H-V)^2 \psi_{n\ell mj} = (E_n - V)^2 \psi_{n\ell mj} \tag{4.31}$$

وذلك لأن $\psi_{n\ell mj}$ توابع خاصة لـ $\hat{H}$ تقابل E_n . وبمحاكمة مشابهة لتلك التي سبقت ايجاد المعادلة (4.21) نرى ان المصفوفة الجزئية من K والمقابلة الى سوية الطاقة E_n تكون قطرية ، وان عناصر قطرها هي

$$\begin{aligned} K_{n\ell mj, n\ell mj} &= \int (E_n - V)^2 \psi^{+}_{n\ell mj} \psi_{n\ell mj}\, d\tau \\ &= \int_0^\infty r^2 (E_n - V)^2 R^2_{n\ell}\, dr \\ &= E_n^2 \int_0^\infty r^2 R^2_{n\ell}\, dr + \frac{Ze^2 E_n}{2\pi\epsilon_0} \int_0^\infty r R^2_{n\ell}\, dr \\ &\quad + \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \int_0^\infty R^2_{n\ell}\, dr \end{aligned} \tag{4.32}$$

تساوى نتيجة التكامل الاول الواحد لأن $R_{n\ell}$ منظّم . واما التكامل الثاني

$$\frac{e^2 m Z}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{(n-\ell-1)!}{n^2\{(n+\ell)!\}^3} \int_0^\infty e^{-x} x^{2\ell+1} \left(L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}\right)^2 dx \tag{4.33}$$

فلقد تم حسابه في (IX . A . 30) ، والنتيجة هي

$$\frac{e^2 m Z}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \tag{4.34}$$

اما التكامل الثالث

$$(4.35) \qquad 2\left(\frac{e^2 m Z}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\right)\frac{(n-\ell-1)!}{n^3\{(n+\ell)!\}^3}\int_0^\infty e^{-x}\, x^{2\ell}\left(L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\right)^2 dx$$

فيمكن حسابه بالاستفادة من (IX.A.38) والنتيجة هي

$$(4.36) \qquad \left(\frac{e^2 m Z}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{n^3(\ell+1/2)}$$

من المعادلة (4.32) نجد الان ان

$$(4.37) \qquad K_{n\ell mj,n\ell mj} = E_n^2\left[\frac{4n}{\ell+1/2} - 3\right]$$

وينتج من هذا ان التصحيح الواجب اجراؤه على السوية E_n هو

$$(4.38) \qquad E_n \cdot (\alpha Z)^2 \frac{1}{n^2}\left[\frac{n}{\ell+1/2} - \frac{3}{4}\right]$$

بتطبيق هذا التصحيح على المعادلة (4.26) نجد ان سوية الطاقة المضطربة المرتبطة بالأعداد (n,ℓ,m,j_+) هي

$$(4.39) \qquad E_{n\ell j_+} = E_n\left[1+\left(\frac{\alpha Z}{n}\right)^2\left(\frac{n}{\ell+1} - \frac{3}{4}\right)\right]$$

وبتطبيقه على المعادلة (4.27) نجد ان السوية المضطربة المرتبطة بالأعداد (n,ℓ,m,j_-) هي

$$(4.40) \qquad E_{n\ell j_-} = E_n\left[1+\left(\frac{\alpha Z}{n}\right)^2\left(\frac{n}{\ell} - \frac{3}{4}\right)\right]$$

تكافئ المعادلتان الاخيرتان معادلة واحدة

$$(4.41) \qquad E_{n\ell j} = E_n\left[1+\left(\frac{\alpha Z}{n}\right)^2\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right)\right]$$

وهذه المعادلة تتفق اتفاقا مرضيا مع التجربة .

قام ديماك عام / 1928 / بأخذ الهاميلتوني بشكله الكامل (4.28) واستبدل بمعادلة شرودنجر معادلة جديدة للطاقة تحمل اسمه ، وبذلك تمكن ديراك من اخذ الاثار النسبية في الاعتبار جميعا . اظهر ديراك ان الطاقة المقابلة لحالة معينة بالاعداد الكوانتية (n, ℓ, m, j) تعطى بالعلاقة

$$E = mc^2 \left[1 + \left\{ \frac{\alpha Z}{n - j - \frac{1}{2} + \sqrt{(j + 1/2)^2 - \alpha^2 Z^2}} \right\} \right]^{-1/2} \qquad (4.42)$$

ونلاحظ انه اذا نشرنا الطرف الايمن على شكل سلسلة في القوى المتصاعدة لثابت البنية الدقيقة α ، فانا نرى ان المنشور مأخوذا حتى الحد في α^4 ينطبق مع (4.41) بعد اهمال حد الطاقة السكونية mc^2 الذى يظهر في هذا المنشور .

* * *

المصطلحات الأجنبية

a

Accidental degeneracy .... تحلل عَرَضـــي
Addition of angular momenta .... جمع العزوم الحركية
Additive .... جمعـــي
Adjoint of an operator .... المؤثر المرافـــق
Alkali metals .... المعادن القولوية
Allowed transitions .... انتقالات مسموح بها
Alpha particles .... جسيمات ألفـــا
Amplitude .... سعـــة
Angular momentum .... العزم الحركي (أوالزاوى)
- frequency .... التواتر الزاوى (أو النبض)
- orbital angular momentum .... العزم الحركي المداري
- spin - - العزم الحركي السبيني (أو السبين)
Annihilation operator .... مؤثر هدم (أو افناء)
Anticommute .... ضد يتبادل
Antisymmetric .... ضد متناظـــر
Approximation .... تقريـــب
Associated Legendre polynomials ...... كثيرات حدود ليجندر المرفقة
Associative .... تجميعـــي
Asymptotic behaviour .... السلوك المقارب
Average value .... القيمة الوسطـى

b

Basis .... قـاعدة

Bohr ....

- atom .... ذرة بـــور

- magneton .... مغنيتون بور

- raduis .... نصف قطر بـــور

Bose-Einsteinstatistics .... احصاء بوزه ـ اينشتين

Bosons .... بوزونات

Boundary conditions .... الشروط الحدية

Bounded operators .... موئثرات محدودة

- functions .... توابع محدودة

c

Canonical variable .... متحول قانوني

- coordinates and momenta .. الاحداثيات والدفوع القانونية

- ly conjugate variables .... متحولات قانونية مترافقة

Centre of mass .... مركز الكتلـــة

Central .... مركزى

- force .... قوة مركزية

- field .... حقل مركزى

Classical mechanics .... الميكانيك الكلاسيكي

Closed system .... جملة مغلقة

- shell .... طبقة مغلقة (أوقشرة مغلقة)

Commutator .... المبادل

Commutative .... تبديلي

Commutation relations .... الملاقات التبديلية

Compatible observables .... ملحوظات متآلفة

Complete ....

- description .... وصف كامل

- set of functions .... مجموعة كاملة من التوابع

- - - compatible observables مجموعة كاملة من الملحوظات الفيزيائية المتآلفة

Complex function .... تابع مركب

Conserved .... محفوظ

Conservation .... انحفاظ

- of angular momentum .... انحفاظ العزم الحركي

- of parity ....انحفاظ التماثل

- of probability ....انحفاظ الاحتمال

- of momentum .... انحفاظ الدفع

- of energy .... انحفاظ الطاقة

Conservation laws .... قوانين الانحفاظ

Constants of motion .... ثوابت الحركة

Continuity conditions .... شروط الاستمرار

- equation .... معادلة الاستمرار

Continuous spectrum .... طيف مستمر

Convergence .... تقارب

Coordinate representation..(أو تمثيل شرود نجر) التمثيل الاحداثي

Creation operator .... (أو خلق) مؤثر بنّاء

Current density .... كثافة تيار

d

d - state .... d حالة

Degenerate .... متحلل

Degeneracy of eigenvalues .... تحلل القيم الخاصة

Diagonal matrix .... مصفوفة قطرية

Diatomic molecule .... جزئ ثنائي الذرة

Differentialoperator .... مؤثر تفاضلي

Dipole .... ثنائي قطب (أو مزوج)

Discrete spectrum .... طيف منقطع

Displacement .... ازاحة

Distribution .... توزع (أو توزيع)

Doublet .... ثنائية

Dynamical variable .... متحول ديناميكي

e

Eigenequation .... معادلة خاصة

Eigenfunction .... تابع خاص

Eigenstate .... حالة خاصة

Eigenvalue .... قيمة خاصة

Eigenvector .... شعاع خاص

Electromagnetic field .... حقل كهرطيسي

Electronconfiguration .... الشكل الالكتروني

Elementary particles .... الجسيمات الأولية

Energy .... طاقة

- eigenvalues .... القيم الخاصة للطاقة

- levels .... سويات الطاقة

- operator .... مؤثر الطاقة

Equation of motion .... معادلة الحركة

Equivalent representations .... تمثيلات متكافئة

Euclidean space .... فراغ اقليدى

Even state function .... تابع حالة زوجي

Excited state .... (أومثارة) حالة مهيجة

Exclusion principle .... مبدأ الاستبعاد

Expansion of a function .... نشر تابع

Expectation value ....القيمة المتوقعة

f

f- state .... الحالة f

Fermi- Dirac statistics .... احصاء فيرمي ـ ديراك

Fermions .... فيرميونات

Fine structure constant .... ثابت البنية الدقيقة

Forbidden transitions .... (ممنوعة) انتقالات محظورة

Free motion .... حركة حرة

g

Generalized coordinates ....احداثيات معممة

momenta .... دفوع معممة

Ground state .... (أو الارضية) الحالة الدنيا

Group .... زمرة

Gyromagnetic ratio ....النسبة الجيرومغناطيسية

h

Half-Life .... نصف العمر

Hamiltonian ....

- function .... تابع هاميلتون

- operator .... موثر هاميلتون أو الهاميلتوني
Hamilton's equations of motion..... معادلات هاميلتون في الحركة
Harmonic oscillator .... الهزاز التوافقي
Heisenberg ....
- equations of motion .... معادلات هيزنبرغ في الحركة
- picture .... صورة هيزنبرغ
- uncertainty principle .... مبدأ هيزنبرغ في الشك
Hermite polynomials .... كثيرات حدود هرميت
Hermitian adjoint .... المرافق الهرميتي
Hilbert space .... فراغ هلبرت
Hydrogen-like atoms .... ذرات شبه هيدروجينية

i

Identity .... هوية أو ذاتية
Identical particles .... جسيمات متطابقة
Identity operator _..................... المؤثر المطابق
Indistinguishable particles .... جسيمات غير متمايزة
Infinite .... غير منته أو لا منته
Infinitesimal transformation .... تحويلات لا متناهية في الصغر
Infinitesimal operator .... مؤثر لا منته في الصغر
Inner product .... جداء داخلي (أو سلمي)
Interaction with an electromagnetic field...............
التفاعل مع حقل كهرطيسي ....
Interference .... تداخل
Internal energy........................ طاقة داخلية
Invariant .... لا متغير

Inverse operator .... الموءثر المقلوب (أو مقلوب الموءثر)

j

jj coupling................................. التزاوج jj

l

Lagrange's equation .... معادلة لاغرانج

Lagrangian .... تابع لاغرانج

Laguerre polynomials .... كثيرات حدود لاغيور

Laplacian operator .... موءثر لابلاس (أو اللابلاسيان)

Legendre polynomials .... كثيرات حدود ليجندر

Linear independence .... الاستقلال الخطي

Linear operator .... موءثر خطي

Lorentz condition .... شرط لورانتز

LS coupling .... التزاوج LS

m

Magnetic .... مغناطيسي

- dipole .... مزوج مغناطيسي

- field .... حقل مغناطيسي

- moment .... عزم مغناطيسي

- quantum number .... عدد كمي مغناطيسي

Matrix representation .... التمثيل المصفوفي

Mean-Square deviation (variance)....... الانحراف الوسطي التربيعي

Measurenent .... قياس

Compatible - .... قياسات متآلفة

maximal - .... قياس اعظمي
Mixed states .... حالات مختلطة
Momentum .... دفع

n

Normalization .... استنظام
Mormalized fumction .... تابع مستنظم

o

Observable .... ملحوظ (اومقيس)
One - dimensional motion .... حركة في بعد واحد
Operator .... موئثر
Hermitian - .... موئثر هرميتي
Self- adjoint - .... موئثر مترافق ذاتيا
Linear - .... موئثر خطي
Unitary - .... موئثر واحدى
Orbital angular momentum .... العزم الحركي المدارى
Orthogonal functions .... توابع متعامدة
Orthonormal .set .... مجموعة متعامدة مستنظمة
Oscillator .... هزاز

p

p - state .... حالة p
Parity .... تماثل
Particle .... جسيم
Pauli matrices .... مصفوفات باولي

Pauli exclusionprinciple .... مبدا باولي في الاستبعاد

Periodic .... دوري

- Law .... القانون الدوري
- table .... الجدول الدوري

Perturbation theory .... نظرية الاضطراب

Phase .... طور

Photon .... فوتون

Planck 's constant .... ثابت بلانك

Plane wave .... موجة مستوية

Poisson brackets .... اقواس (أو معترضات) بواصون

Postulate .... مسلمة

Position .... موضع

Potential well .... بئر كموني

Potential step .... عتبة كمونيــة

Precession of spin .... ترنح السبين

Probability .... احتمــال

- Conservation .... انحفاظ الاحتمال
- interpretation .... التفسير الاحتمالي
- density .... الكثافة الاحتمالية
- distribution .... التوزع الاحتمالي

Pure states .... حالات خالصه

q

Quanta .... كوانتا (أو كمات)

Quantization .... تكميم

Quantum numbers .... اعداد كمية (أو كوانتية)

magnetic quantum number .... العدد الكمي المغناطيسي
Orbital quantum number .... العدد الكمي المدارى
principalquantum number................. العدد الكمي الرئيسي

r

Radial .... قطارى
- function .... تابع قطرى
- motion .... حركة قطرية
- Schrodinger equation .... معادلة شرود نجر القطارية

Radiation .... اشعاع
Random variable .... متحول عشوائي
Reduced mass .... كتلة مختزلة
Reflection .... انعكاس
Relative .... نسبي
- motion .... حركة نسبية
- probability .... احتمال نسبي

Relativistic quantum mechanics .... ميكانيك الكم النسبوى
Representation .... تمثيل
Rotation .... دوران
Russell-Saunders coupling .... تزاوج راسل ساندرز

S

s - State .... الحالة- s
Scalar product .... (جداء سلمي (أو داخلي
Scattering .... تشتت
Schrodinger equation .... معادلة شرود نجر

representation .... تمثيل شرود نجر

Schwartz inequality .... متراجحة شوارتز

Selection rules .... قواعد الاصطفاء

Semiconductor .... نصف ناقل

Simultaneous eigenfunctions .... توابع خاصة مشتركة (آنية)

- measurements.................... قياسات متواقتة

Simultaneously measurable .... تقبل القياس معا

Single valued function..................... تابع وحيد القيمة

Singular matrix .... مصفوفة شاذة

Space .... فراغ

Euclidean .... فراغ اقليدى

Hilbert - .... فراغ هلبرت

Inner Product - .... فراغ الجداء الداخلي

of wave functions .... فراغ التوابع الموجية

specific heat .... الحرارة النوعية

Spectroscopy .... علم الاطياف

Spin .... السبين

- angular momentum .... العزم الحركي السبيني

Spherical coordinate .... الاحداثيات الكروية

harmonics .... التوافقيات الكروية

Square-integrable functions .... التوابع التربيعية المكاملة

Standing waves .... الأمواج المستقرة

State .... حالة

- function .... تابع الحالة

Stationary state .... حالة مستقرة

Statistical distribution .... توزع احصائي
Superposition .... تراكيب او تركيب
Symmetric wave functions .... توابع موجية متناظرة
Symmetry .... تناظر
System .... جملة
- of noninteracting particles. جملة جسيمات غير متفاعلة فيما بينها

t

Time -dependent .... تابع للزمن
Time-independent .... مستقل عن الزمن
Total anguler momentum .... العزم الحركي الكلي
Total mass .... الكتلة الكلية
Trace .... أثر
Transformation .... تحويل
Transition probability .... احتمال الانتقال
Translation .... انسحاب
Translational energy .... الطاقة الانسحابية
Transmitted wave .... موجة نافذة
Transpose of a matrix .... منقول مصفوفة

u

Unitary .... واحدى
- Group .... زمرة واحدية
- Operator .... مؤثر واحدى
- transformation .... تحويل واحدى

Uncertainty principle .... مبدأ الشك (أو الارتياب)

Uniform .... منتظم

V

Valence electron .... الالكترون التكافؤى

Variational methods........................ طرائق التغيير

Vector space .... فراغ شعاعي

Vector normalization .... استنظام شعاع

W

Wave equation .... المعادلة الموجية

- function .... التابع الموجي

- number .... العدد الموجي

Wave-particle duality .... الازدواجية موجة - جسيم

Z

Zeeman effect .... مفعول زيمن

المراجع

REFERENCES

1.Messiah A. 1974 Quantum Mechanics. North Holland Publishing Company .

2.Prugovecki E. 1970 Quantum Mechanics in Hilbert Space. Academic Press, New York & London.

3.Fano G. 1967 Mathematical Methods of Quantum Mechanics, Mc Graw-Hill Book company New York & London.

4.Matthews P.1968 Introduction to Quantum Mechanics, Mc Graw-Hill Book Company,New York & London.

5.Pauling L.&Wilson B. 1935. Introduction to Quantum Mechanics, Mc Graw-Hill Kogakusha, Ltd., Tokyo & London.

6.Alonso M.& Finn E. 1968 Fundamental Univeristy Physics,Vol. III, Quantum and Statistical Physics, Addison-Wesley Publishing Company.

7.Merzbacher E.1971 Quantum Mechanics, John Wiley &Sons. Inc.New York & London.

8.Beiser A. 1963 Concepets of Modern Physics, Mc Graw-Hill Book Company, New York & London.

9.Dicke R.& Wittke J. 1960 Introduction to Quantum Mechanics, Addison-Wesley Publishing Company.

10. Lawden D. 1967 — The Mathematical Principles of Quantum Mechanics. Metheun & Co. Ltd. 11 New Fetter Lane, London, EC4

11. Landau L. & Litshitz E. 1965 — Quantum Mechanics, Translated from the Russian by Sykes J. & Bell J. Second English Edition, Pergamon press, Oxford, Toronto, New York & Paris .

12. Lichenberg D. 1970 — Unitary Symmetry and Elementary Particles, Academic Press, New York & London.

13. Orear J. 1979 — Physics. Macmillan Publishing Co. Inc., New York (or collier Macmillan publishers, London).

14. Kittel C. 1976 — Introduction solid State Physics. Fifth Edition , John Wiley & Sons, Inc., New York & London.

15. Cornwell J. 1969 — Group Theory and Electronic Energy Bands in Solids. North Holland Publishing Company, Amsterdam & London.

16. Landau L. & Litshitz E . 1973 . — Mechanics, Nauka, Moscow .

17. Kompaneyets A. — Theoretical Physics, Mir, Moscow .

18. Mckelvey J. 1956 — Solid State and Semiconductor Physics Harper & Row, New York & London, (or John Weatherhill, Inc., Tokyo).

متاح للتحميل ضمن مجموعة كبيرة من المطبوعات من صفحة
مكتبتي الخاصة
على موقع ارشيف الانترنت
الرابط
https://archive.org/details/@hassan_ibrahem

صدر هذا الكتاب تحت اشراف
لجنة انجاز الكتاب الجامعي
١٩٨٣